

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

Аналоги релятивистских эффектов в классической механике

А.И. Мусиенко, Л.И. Маневич

Обсуждаются аналоги релятивистских эффектов в классической механике, которые наблюдаются при движении солитонов в твердых телах. Эти эффекты описываются формулами, аналогичными формулам специальной теории относительности, но вместо скорости света в них входит скорость звука. Показано, что эти параллели являются частью соответствия между теорией солитонов и теориями поля (в частности, электродинамикой). Рассматривается влияние нарушения лоренц-инвариантности в механических системах на динамические свойства солитонов. Показано, что в таких системах могут распространяться сверхзвуковые солитоны (в частности, дислокации).

PACS numbers: 03.30.+p, 05.45.Yv, 11.15.-q, 61.72.Lk

Содержание

1. Введение (861).
 2. Релятивистские и квазирелятивистские эффекты в динамике солитонов в одномерных системах (864).
 - 2.1. Динамика солитонных решений уравнения синус-Гордона.
 - 2.2. Сверхзвуковые динамические солитоны.
 - 2.3. Сверхзвуковые топологические солитоны.
 3. Релятивистские и квазирелятивистские эффекты в динамике дислокаций (876).
 - 3.1. Динамика винтовых дислокаций.
 - 3.2. Динамика краевых дислокаций.
 - 3.3. О происхождении релятивистских и квазирелятивистских эффектов в теории дислокаций.
 - 3.4. Трансзвуковые и сверхзвуковые дислокации.
 4. Калибровочная теория линейных дефектов и фундаментальные теории поля (880).
 - 4.1. Калибровочная теория линейных дефектов и электродинамика.
 - 4.2. Калибровочная теория линейных дефектов и теория гравитации.
 5. Заключение (884).
- Список литературы (885).

1. Введение

Хорошо известно, что в рамках классической механики¹ существует аналог оптики: линейная акустика. Релятивистская же механика (специальная теория относитель-

¹ Всюду в этой статье под классической механикой мы понимаем механику, основанную на законах Ньютона, т.е. нерелятивистскую механику.

А.И. Мусиенко, Л.И. Маневич. Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН
119991 Москва, ул. Косыгина 4, Российская Федерация
Тел. (095) 939-72-35. Факс (095) 137-82-84
E-mail: andrew@polymer.chph.ras.ru, lmanev@center.chph.ras.ru

Статья поступила 14 января 2003 г.,
после доработки 10 мая 2004 г.

ности), на первый взгляд, не может иметь классического аналога. Между тем, развитие нелинейной динамики привело к открытию классических частицеподобных объектов — солитонов [1], описываемых лоренц-инвариантными уравнениями и, так же как релятивистские частицы, имеющих непрерывный и ограниченный спектр скоростей $0 \leq v < v_s$, где v_s — скорость звука. Движение солитонов сопровождается эффектами, связанными с конечностью скорости звука, аналогичными релятивистским эффектам специальной теории относительности. Среди этих эффектов — лоренцевское сокращение ширины движущегося солитона [1], изменение формы поля механических напряжений движущегося топологического дефекта [2], лоренцевская зависимость энергии солитона от его скорости [1] и т. д. Формулы, описывающие эти эффекты, аналогичны формулам специальной теории относительности, но вместо скорости света в вакууме в них входит скорость звука.

Эффекты, связанные с конечностью скорости звука, в механических системах, обладающих лоренцевской симметрией, мы будем называть "релятивистскими". Такая терминология уже установилась в литературе, хотя, возможно, она удивит читателей, не знакомых с теорией солитонов. Однако никого не удивляет, что различные оптические эффекты имеют аналоги в акустике. Названия этих эффектов в оптике и в акустике совпадают: дифракция, интерференция, дисперсия. Использование общих терминов отражает общность математического описания этих эффектов, при всем различии величины констант (скорости звука и скорости света). Аналогию между динамикой солитонов и специальной теорией относительности можно рассматривать как продолжение аналогии между акустикой и оптикой. Здесь кроме волн присутствуют еще и частицы (в специальной теории относительности) и солитоны (в классической механике). Мы снова видим аналогичные эффекты: лоренцевскую зависимость ширины объекта (частицы или солитона) от его скорости, соотношение эквивалентности между массой и энергией покоя объекта вида $E = mc^2$ (c — скорость света в случае специальной теории относительности или

скорость звука в классической механике), аннигиляцию частицы и античастицы (в механике — солитона и анти-солитона) с излучением энергии в виде электромагнитных (в механике — звуковых) волн. Очевидно, что все это не является случайным совпадением, а отражает общность математического описания процессов, происходящих как в механике, так и в электродинамике. Эта общность связана с конечностью скорости передачи информации (скорости звука или света), или, другими словами, с запаздыванием сигналов, и с лоренцевской симметрией уравнений динамики. Общность математического описания определяет и общность терминологии. Поэтому использование термина "релятивистские" для описания механических эффектов, связанных с конечностью скорости передачи информации, оправдано в той же степени, что и использование термина "дифракция" как в случае света, так и для звука.

Обсуждаемая аналогия имеет место как для солитонов в одномерных системах (простейший случай — механические модели, описываемые уравнением синус-Гордона), так и, например, для винтовых дислокаций в трехмерном упругом континууме. Однако в классической механике конечность скорости передачи информации не всегда приводит к лоренцевской симметрии. Так, в твердом теле даже в изотропном случае существуют две скорости передачи информации: скорости продольных и поперечных звуковых волн. Поэтому при описании движения любых дислокаций, кроме прямолинейных винтовых, все физические величины расщепляются на компоненты, трансформирующиеся по преобразованиям Лоренца с различными параметрами (скоростями продольных и поперечных звуковых волн) [2]. В анизотропных телах число скоростей звука по любому направлению увеличивается до 3, что делает описание динамики топологических дефектов еще более сложным. В этих случаях еще можно использовать преобразования Лоренца. Но при исследовании реальных физических систем часто необходимо включать в уравнения движения сплошной среды слагаемые, учитывающие градиентную нелинейность (например, члены вида $\partial^2(u^3)/\partial x^2$) и градиентную дисперсию (слагаемые типа $\partial^4 u/\partial x^4$). Это приводит к тому, что уравнения движения не удовлетворяют условию лоренц-инвариантности. Тем не менее, в теории по-прежнему существуют эффекты, связанные с конечностью скорости передачи информации. На качественном уровне аналогия со специальной теорией относительности сохраняется. Ниже мы покажем (см. раздел 2), что и в таких системах, например, ширина солитона уменьшается с ростом его скорости. Однако лоренцевские соотношения непригодны для описания динамики этих систем. Мы будем называть эффекты, связанные с конечностью скорости передачи информации в системах, не обладающих лоренцевской симметрией, "квазирелятивистскими". Этот термин отражает тот факт, что источником таких эффектов, как и соответствующих эффектов в лоренц-инвариантных моделях, является конечная скорость передачи информации. Различие заключается только в симметрии динамических уравнений.

Некоторые нелинейные уравнения, не удовлетворяющие условию лоренц-инвариантности, имеют сверхзвуковые солитонные решения. В разделе 2 будет показано, что их существование не нарушает ни принцип причинности, ни другие законы физики. В различных механических

системах сверхзвуковые солитоны могут иметь как непрерывный спектр скоростей, так и дискретный.

Ситуация становится еще более сложной при учете дискретной структуры реальных физических систем. К сожалению, уравнения, описывающие дискретные механические системы, как правило, не имеют аналитических солитонных решений. Поэтому мы можем исследовать их свойства лишь при помощи физического эксперимента или численного моделирования.

Описанную выше аналогию между оптикой и акустикой можно продолжить и далее. В рамках классической механики существует аналог классической электродинамики, т.е. теории, описывающей не только распространение электромагнитных волн, но и их взаимодействие с заряженными частицами. Как показал Косевич [3], таким аналогом является динамическая теория дислокаций, т.е. топологических солитонов в кристаллической решетке. В этой теории дислокации соответствуют электрическим зарядам, а поля упругих деформаций и механических напряжений — электромагнитному полю. Позже в работе Мусиенко и Копчика [4] было показано, что динамическую теорию дислокаций можно сформулировать как четырехмерную калибровочную теорию. Неоднозначность потенциала упругого поля дислокации (так называемая "калибровочная свобода") связана с неоднозначностью выбора поля смещений частиц среды (в континуальном приближении) вокруг дислокации. Тензорная размерность многих физических величин в калибровочной теории дислокаций отличается от размерности их электродинамических аналогов. Кроме того, тензоры дисторсий и механических напряжений в наиболее общем случае не являются ни симметричными, ни антисимметричными, в то время как аналогичный им тензор электромагнитного поля является антисимметричным. Но тем не менее каждая формула и каждый эффект электродинамики имеют точные и однозначные аналоги в рамках теории дислокаций. Калибровочная теория дислокаций и дисклинаций, построенная в работах Кадич и Эделена [5], также основана на аналогии между теорией дефектов и электродинамикой, но эта аналогия принципиально отличается от той, что была использована в работах [3, 4]. Более подробно мы рассмотрим эту проблему в разделе 4.

Во избежание недоразумений мы хотим прежде всего разъяснить, что мы понимаем под словом "солитон". Математики называют солитоном локализованное частицеподобное решение вполне интегрируемой нелинейной системы уравнений, описывающее возбуждение с конечной энергией [6]. Физики обычно дают более широкое определение и считают, что солитон — это локализованное стационарное или стационарное в среднем возмущение однородной или пространственно-периодической нелинейной среды [7]. Особый класс солитонов образуют топологические солитоны, т.е. солитоны, обладающие топологическими зарядами. Это определение позволяет включить в число топологических солитонов все топологические дефекты в конденсированных средах: дислокации и дисклинации в кристаллах, квантованные вихри в сверхтекучем жидком гелии, вихревые дефекты и доменные стенки в ферромагнетиках, дисклинации в жидких кристаллах, вихри Абрикосова в сверхпроводниках, фрустрационные линии в спиновых стеклах и т.д. Физический подход к понятию солитона принципиально отличается от математиче-

ского не только возможностью рассмотрения неинтегрируемых систем, но и тем, что позволяет отнести к солитонам те конфигурации, для которых неизвестны точные решения соответствующих нелинейных уравнений. В некоторых случаях такие решения удастся найти численно, а их динамическое поведение изучать методами компьютерного моделирования. Более того, физики-экспериментаторы могут исследовать поведение топологических солитонов в конденсированных средах даже в тех случаях, когда не известны сами определяющие уравнения, решениями которых эти солитоны являются. Солитоны, не обладающие топологическим зарядом, называются динамическими.

Напомним, что топологические заряды представляют собой элементы гомотопической группы $\pi_i(V)$, где V — пространство параметра порядка (иногда его также называют пространством вырождения) [8, 9]. V — это область всех значений, которые может принимать параметр порядка (параметр вырождения) без изменения энергии системы. Например, в трехмерном кристалле параметром порядка является трехмерный вектор смещений атомов. Поскольку смещение решетки на период приводит к той же структуре, которая соответствует нулевому смещению, пространство вырождения кристаллической решетки представляет собой куб, противоположные грани которого эквивалентны, т.е. трехмерную поверхность тора T^3 в четырехмерном пространстве [10]. Каждый элемент группы $\pi_i(V)$ задается гомотопическим классом отображений i -мерной сферы $S^i \rightarrow V$. Выбор i определяется размерностью изучаемых солитонов v (в математической литературе такие объекты также называют сингулярностями и топологическими особенностями): $i = d - v - 1$, где d — размерность пространства M , в котором находятся солитоны. Например, для измерения зарядов дислокаций, которые являются точечными (т.е. нульмерными) топологическими солитонами в двумерном пространстве и одномерными солитонами в трехмерном, нужно выбрать $i = 1$. Используемые в теории дислокаций [10] контуры Бюргерса γ отображаются в замкнутые контуры Γ в пространстве параметра порядка V . Если внутри контура Бюргерса нет дислокации, его образ Γ стягивается в точку. Это отображение соответствует единичному элементу группы $\pi_1(T^3)$, т.е. нулевому топологическому заряду. Если внутри контура Бюргерса находится дислокация, его образ на торе Γ характеризуется тремя топологическими инвариантами n_1, n_2, n_3 — числами обходов трех образующих тор окружностей. Контуры, характеризуемые различными числами обходов, соответствуют различным гомотопическим классам отображений, т.е. не могут быть совмещены непрерывным преобразованием. Каждый класс отображений задает определенное значение топологического заряда: набор топологических инвариантов (n_1, n_2, n_3) . Этот набор однозначно определяет значение вектора Бюргерса $\mathbf{b} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$, где $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ — трансляционные векторы кристаллической решетки. Винтовая дислокация, т.е. дислокация с вектором Бюргерса, параллельным линии дефекта, изображена на рис. 1. В континуальном приближении вектор Бюргерса представляет собой интеграл

$$b_i = \oint_L du_i = \oint_L \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_k, \quad (1)$$

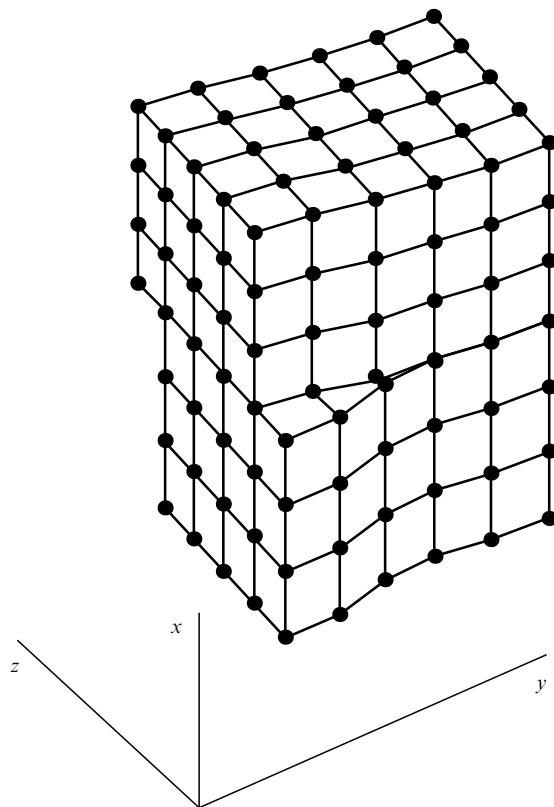


Рис. 1. Винтовая дислокация в трехмерном кристалле.

где L — любой замкнутый контур, охватывающий дислокацию, u_i — вектор смещений частиц среды.

В этой статье в основном будут рассматриваться солитоны в механических системах (за исключением особо оговоренных случаев). Параметром порядка для этих солитонов служит смещение частиц. В твердых телах такие солитоны являются элементарными носителями пластичности. Наиболее известный пример солитонов этого рода — дислокации в кристаллах. Возможно, менее известен тот факт, что носителями пластичности в трехмерных кристаллах могут быть и точечные (нульмерные) топологические солитоны. Это имеет место, например, в трехмерных полимерных кристаллах, состоящих из параллельных макромолекул. Такие солитоны существенно влияют на механические свойства твердых тел (пластичность, прочность). Они также взаимодействуют с колебательными модами тела, рассеивают их энергию и таким образом вносят вклад во внутреннее трение и теплопроводность.

Разумеется, роль параметра порядка может играть не только смещение, но и другие физические величины. Иному выбору этого параметра соответствуют другие солитоны. В настоящее время солитоны исследуются практически во всех разделах физики. Солитоны обнаружены в жидкостях (солитоны на поверхности воды) [11], в газообразных системах (волны Россби) [11, 12], в плазме (ленгмюровские, циклотронные, ионно-звуковые солитоны и т.д.) [12], в различных твердых телах (в кристаллах, сверхпроводниках, спиновых стеклах и т.д.), в световодах из стекловолокна (оптические солитоны) [13]. Обсуждается возможная роль солитонов в астрофизике [14] и физике элементарных частиц [15].

Концепция солитонов широко используется в биофизике. В настоящее время признано, что солитоны Давыдова [13] играют фундаментальную роль в эффективном бездисперсионном переносе энергии в сложных биологических объектах, таких как белки, ДНК и другие биомолекулы. Пик, соответствующий этим солитонам, обнаружен в инфракрасных спектрах кристаллического ацетанилида. Значительный интерес представляет возможная роль солитонов Давыдова в механизмах нетеплового воздействия электромагнитных полей на живые клетки. Подробный обзор теоретических и экспериментальных работ, посвященных изучению солитонов Давыдова, имеется в статье [16]. Кроме того, исследуются другие типы солитонов в биологических объектах (в частности, в ДНК [17, 18], нервных волокнах и биологических тканях [19]).

Мы не будем обсуждать применение солитонов во всех этих системах по следующим причинам. Во-первых, объем нашей статьи ограничен. Во-вторых, приложениям теории солитонов в различных разделах физики посвящен целый ряд монографий и обзорных статей, которые мы не хотим повторять. Главная цель данной работы — дать обзор тех эффектов в динамике солитонов, которые связаны с конечностью скорости передачи информации (релятивистских и квазирелятивистских). Для того чтобы максимально упростить для читателей понимание физической природы этих эффектов, мы решили ограничить наше рассмотрение самыми простыми из систем, допускающих существование солитонов, — механическими. Задачи данной статьи — сопоставить релятивистские и квазирелятивистские эффекты в классической механике с аналогичными эффектами специальной теории относительности, обсудить причины появления таких эффектов в рамках классической механики, а также аналогии между динамикой солитонов и калибровочными теориями поля (в частности, электродинамикой и теорией гравитации), показать, что в динамике солитонов существуют квазирелятивистские эффекты, не имеющие аналогов в специальной теории относительности: в частности, могут появляться формулы, не удовлетворяющие условию лоренц-инвариантности, возможно движение солитонов со сверхзвуковыми скоростями.

Во втором разделе работы рассмотрены релятивистские и квазирелятивистские эффекты в динамике солитонов (как топологических, так и динамических) в одномерных системах. На примере наиболее известного уравнения синус-Гордона продемонстрирована аналогия между релятивистскими эффектами в теории солитонов и в специальной теории относительности. Дан обзор полученных различными авторами результатов, относящихся к сверхзвуковому движению солитонов и солитоноподобных возбуждений.

В третьем разделе рассмотрены релятивистские и квазирелятивистские эффекты в динамике дислокаций (одномерных топологических солитонов). Продемонстрирован более сложный характер этих эффектов по сравнению с эффектами специальной теории относительности, что объясняется существованием в твердых телах нескольких скоростей звука. Рассмотрен вопрос о происхождении этих эффектов в механике твердого тела. Дан обзор работ, посвященных сверхзвуковым дислокациям.

В четвертом разделе обсуждаются аналогии между калибровочной теорией дислокаций и дисклинаций и

фундаментальными полевыми теориями (электродинамикой и теорией гравитации).

В заключении суммированы итоги работы и обсуждены перспективы дальнейшего изучения затронутых в ней проблем.

2. Релятивистские и квазирелятивистские эффекты в динамике солитонов в одномерных системах

2.1. Динамика солитонных решений уравнения синус-Гордона

Рассмотрим в качестве первого примера классическую одномерную модель дислокации Френкеля–Конторовой [2]. Цепочка частиц массы m , соединенных линейными пружинами с коэффициентами упругости k , находится в периодическом синусоидальном потенциале. Этот потенциал описывает взаимодействие цепи с некоторым внешним объектом — подложкой. В определенной области цепочка может быть растянута (или сжата) так, что число частиц оказывается на единицу меньше (или больше) числа потенциальных ям. Такая конфигурация называется кинком (или, соответственно, антикинком). Пусть a — период потенциала, U_n — смещение n -й частицы относительно n -й ямы, $u_n = U_n/a$. Уравнение движения цепочки (т.е. второй закон Ньютона) имеет вид:

$$m\partial_t^2 u_n - k(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + \frac{A}{2\pi a^2} \sin 2\pi u_n = 0,$$

где $\partial_t \equiv \partial/\partial t$, A — постоянная, $-\infty < n < \infty$.

Чтобы перейти к континуальному описанию, выберем единицу измерения пространственных масштабов равной $\varepsilon^{-1}a$, где $\varepsilon \ll 1$. Малый параметр ε характеризует отношение расстояния между частицами к характерному пространственному масштабу решения. При таком выборе единицы измерения расстояние между частицами оказывается равным ε . Тогда можно заменить дискретные величины u_n непрерывно меняющимся параметром $u(n)$ (переменная n теперь также считается непрерывной) и использовать тейлоровское разложение

$$u_{n+1} - u_n = \varepsilon \partial_n u + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \partial_n^2 u + \dots,$$

позволяющее получить вместо исходной бесконечной системы уравнений одно нелинейное уравнение в частных производных. В главном приближении оно представляет собой известное уравнение синус-Гордона [1, 15]:

$$\frac{1}{c^2} \partial_t^2 u - \frac{1}{a^2} \partial_n^2 u + \frac{A}{2\pi k a^4} \sin 2\pi u = 0, \quad (2)$$

где $\partial_n \equiv \partial/\partial n$, $c = a(k/m)^{1/2}$ — скорость звука в рассматриваемой цепочке. Перейдем к системе единиц, в которой $a = 1$, $A = 1$, $k = 1$, и обозначим непрерывную пространственную переменную через x . Тогда кинк (топологический солитон) описывается решением уравнения (2):

$$u(x, t) = \frac{2}{\pi} \arctan \exp \frac{x - vt}{\gamma}, \quad (3)$$

где $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{1/2}$, v — скорость кинка. Зависимость u от x при фиксированном t показана на рис. 2. Таким образом, кинк представляет собой локализованную

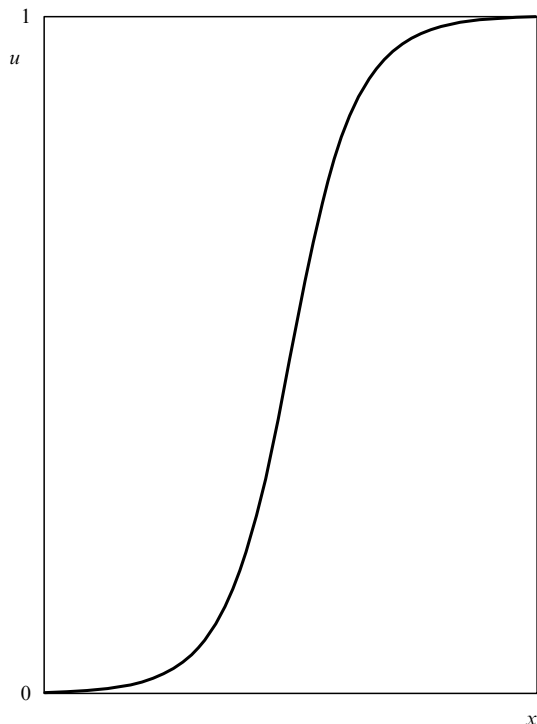


Рис. 2. Солитонное решение (кинк) уравнения синус-Гордона.

область растяжения. Всюду далее в этом разделе будут рассматриваться только такие солитоны, осуществляющие смещение частиц на некоторую величину. Для топологических солитонов эта величина равна топологическому заряду. Если кинк пройдет всю цепь, от левого конца до правого, цепь сместится на один период влево относительно подложки. Антикнк, наоборот, сместит цепь вправо. Таким образом, топологические солитоны являются элементарными носителями пластичности в данной модели.

Из формулы (3) следует, что значительная часть изменения величины u происходит в области вокруг центра кинка, ширина которой равна

$$L = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}. \quad (4)$$

Эта величина называется шириной кинка. Таким образом, ширина кинка зависит от его скорости по лоренцевскому закону, аналогично тому, как изменяется длина движущегося объекта в специальной теории относительности. Но в формулу (4) вместо скорости света входит скорость звука в рассматриваемой цепочке.

Кинетическая энергия цепочки

$$T = \frac{m}{2} \sum_n (\partial_t u_n)^2. \quad (5)$$

Потенциальная энергия цепочки

$$U = \frac{k}{2} a^2 \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{A}{4\pi^2} \sum_n (1 - \cos 2\pi u_n). \quad (6)$$

Полная энергия кинка $E = T + U$. После перехода к непрерывному пределу суммы в (5), (6) заменяются интегралами. Подставив в эти интегралы решение (3),

получаем окончательный результат [1]

$$E = E_0 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2}, \quad (7)$$

где E_0 — энергия неподвижного кинка (энергия покоя). Таким образом, энергия классического кинка зависит от его скорости по известному релятивистскому закону. Из формулы (7) следует, что в случае, когда скорость кинка $v \ll c$, его кинетическая энергия описывается той же формулой, что и кинетическая энергия классической частицы $E = Mv^2/2$, где M — эффективная инертная масса кинка. Она связана с энергией покоя кинка известным соотношением эквивалентности $E_0 = Mc^2$. Отметим, что эти релятивистские результаты получены в рамках классической ньютоновской механики.

Кинк и антикинк могут аннигилировать при столкновении. При этом их энергия излучается в виде звуковых волн. Это явление аналогично аннигиляции частицы и античастицы (например, электрона и позитрона) с излучением энергии в виде электромагнитных волн. В некоторых случаях может образоваться связанное состояние солитона и антисолитона — бризер.

Скотт [20] разработал простую механическую линию передачи, позволяющую экспериментально исследовать динамику солитонов уравнения синус-Гордона. Эта линия представляет собой цепочку маятников, закрепленных на горизонтальной струне. Динамика этой системы описывается уравнением синус-Гордона (2). Тогда переменная $u(x)$ — это угол отклонения маятника в точке x от положения равновесия. Данная система позволяет наблюдать релятивистские эффекты в механике "невооруженным глазом". В частности, Скотт наблюдал описанное выше лоренцевское сокращение ширины движущегося солитона.

Уравнение синус-Гордона используется для описания поведения различных физических систем. В работе Зубовой и др. [21] показано, что динамика полимерной цепи в кристалле полиэтилена в приближении неподвижных соседних цепей описывается уравнением синус-Гордона. Тогда кинки (антикинки) представляют собой дефекты растяжения (или, соответственно, сжатия), т.е. участки цепи, растянутые (сжатые) на величину постоянной решетки относительно соседних цепей. В работе тех же авторов [22] показано, что система уравнений типа синус-Гордона описывает другие дефекты, существующие в кристаллическом полиэтилене, — твистоны. Кристаллы полиэтилена состоят из параллельных плоских зигзагообразных полимерных цепей. Твистоны представляют собой локализованные области кручения полимерной цепи на 180° с растяжением (или сжатием) на полпериода цепи протяженностью несколько десятков периодов. Сходные с твистонами топологические дефекты в кристаллическом политетрафторэтилене были исследованы в работах Савина и Маневича [23, 24]. Эти дефекты представляют собой локализованные области поворота полимерной цепи на угол $14\pi/13$ со сдвигом вдоль оси молекулы на величину, равную $1/13$ периода (напомним, что макромолекула политетрафторэтилена в кристалле имеет форму спирали $13/6$, т.е. содержит 13 групп CF_2 на 6 оборотов).

Таким образом, в рамках классической теории солитонов в одномерном пространстве можно получить различные релятивистские закономерности и эффекты.

Построенные соотношения являются лоренц-инвариантными. Но в рамках классической механики можно получить и более сложные квазирелятивистские формулы, не удовлетворяющие условию лоренц-инвариантности.

2.2. Сверхзвуковые динамические солитоны

Рассмотренное выше уравнение синус-Гордона учитывает нелинейное взаимодействие атомов, описываемое синусоидальной функцией, которая зависит от компонент поля. Но нелинейные взаимодействия в реальных твердых телах значительно сложнее и могут содержать градиентные члены. Учет этих взаимодействий приводит к тому, что уравнение движения атомов утрачивает лоренц-инвариантность. Вполне естественно предположить, что такие уравнения могут обладать солитонными решениями, которым соответствуют сверхзвуковые скорости. Именно исследование сверхзвуковых нетопологических солитонов (в частности, солитонных решений уравнения Кортевега – де Вриза) положило начало современному этапу развития нелинейной динамики, связанному с открытием метода обратной задачи рассеяния [25]. С конца 60-х годов XX века такие солитоны активно изучались как аналитически, так и численно.

Сверхзвуковые динамические солитоны в дискретной одномерной решетке впервые аналитически исследовал Тода [26–28]. Он рассматривал цепочку атомов с экспоненциальным взаимодействием (впоследствии такие цепочки получили название решеток Тода). Пусть a — постоянная решетки,

$$\rho_n \equiv u_{n-1} - u_n \quad (8)$$

— уменьшение расстояний между соседними атомами массы M , вызванное их смещениями u_n . Энергия межатомного взаимодействия

$$U = \sum_n \Phi(\rho_n),$$

где

$$\Phi(\rho_n) = \frac{\kappa}{b} \left\{ -\rho_n + \frac{1}{b} [\exp b\rho_n - 1] \right\}, \quad (9)$$

κ и b — постоянные. В пределе $b \rightarrow 0$ цепочка Тода превращается в гармоническую цепочку, а в противоположном пределе $b \rightarrow \infty$ — в цепь, состоящую из твердых сфер.

Уравнения движения атомов имеют вид

$$M\partial_t^2 \rho_n = \frac{\kappa}{b} (\exp b\rho_{n+1} + \exp b\rho_{n-1} - 2 \exp b\rho_n). \quad (10)$$

Существует солитонное решение этих уравнений (рис. 3):

$$\rho_n = \frac{1}{b} \ln \left\{ 1 + \frac{\sinh^2 qa}{\cosh^2 [q(na - vt)]} \right\}, \quad (11)$$

где скорость солитона

$$v = \frac{c}{qa} \sinh qa, \quad (12)$$

$c = a\sqrt{\kappa/M}$ — скорость продольных звуковых волн в гармонической цепочке, т.е. при $b = 0$. Параметр q

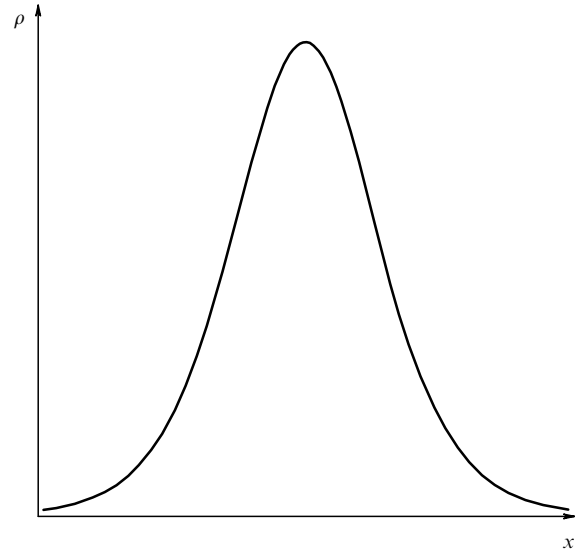


Рис. 3. Сверхзвуковой динамический солитон в решетке Тода.

характеризует обратную ширину солитона: $q \approx 2\pi/L$, где L — ширина солитона. Этот солитон не обладает топологическим зарядом, т.е. является динамическим (иногда используется термин "акустический солитон"). Из формулы (12) следует, что акустические солитоны (11) всегда являются сверхзвуковыми. При $v \rightarrow c$ амплитуда солитона стремится к нулю, а ширина — к бесконечности (рис. 4). Таким образом, прохождение солитоном звукового барьера в данной системе невозможно. Сверхзвуковые солитоны рождаются со скоростями $v > c$.

Если ширина солитона L велика по сравнению с межатомным расстоянием, т.е. $qa \ll 2\pi$, то можно перейти к континуальному приближению. Тогда уравнение движения системы (10) принимает форму уравнения Буссинеска:

$$\left[\partial_t^2 - c^2 \left(\partial_x^2 + \frac{a^2}{12} \partial_x^4 \right) \right] \rho - bc^2 \partial_x^2 \rho^2 = 0. \quad (13)$$

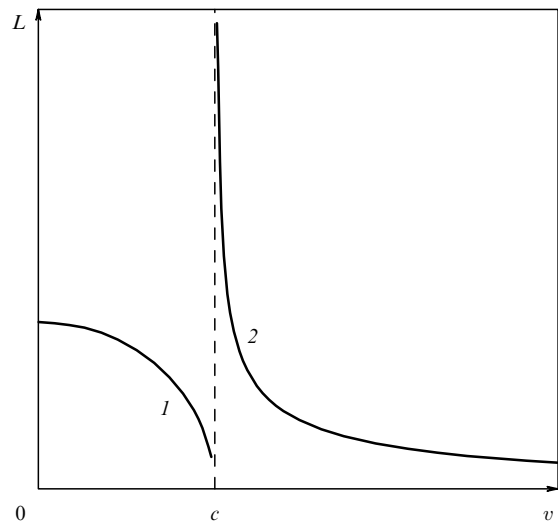


Рис. 4. Зависимость ширины L различных солитонов от их скорости v : 1 — для кинка уравнения синус-Гордона (лоренцевская законность); 2 — для сверхзвуковых динамических солитонов (в частности, солитона в решетке Тода).

Это уравнение имеет солитонное решение

$$\rho = \frac{a^2 q^2}{b} \operatorname{sech}^2 q \zeta, \quad (14)$$

где $\zeta = x - x_0 - vt$,

$$v = c \left(1 + \frac{a^2 q^2}{3} \right)^{1/2}.$$

Зависимость ширины солитона от его скорости описывается выражением

$$L = \frac{2\pi a c}{\sqrt{3(v^2 - c^2)}}. \quad (15)$$

Энергия сверхзвукового солитона $E = K + W$, где кинетическая энергия

$$K = \frac{M}{2a} \int [\partial_t u(\zeta)]^2 d\zeta = \frac{2q^3}{3b^2} M v^2 a,$$

а потенциальная энергия

$$W = \frac{1}{a} \int \Phi[\rho(\zeta)] d\zeta = \frac{2q^3}{3b^2} \kappa a^3 \left(1 + \frac{4}{15} q^2 a^2 \right).$$

Когда скорость сверхзвукового солитона приближается к звуковой, его энергия (как кинетическая, так и потенциальная) стремится к нулю (рис. 5). Таким образом, поведение солитона в области сверхзвуковых скоростей противоположно поведению солитонных решений лоренц-инвариантных уравнений в дозвуковой области, где энергия солитона стремится к бесконечности при приближении его скорости к скорости звука, а ширина — к нулю.

Тода предположил, что сверхзвуковые динамические солитоны должны вносить значительный вклад в теплопроводность диэлектрических кристаллов. Недавние

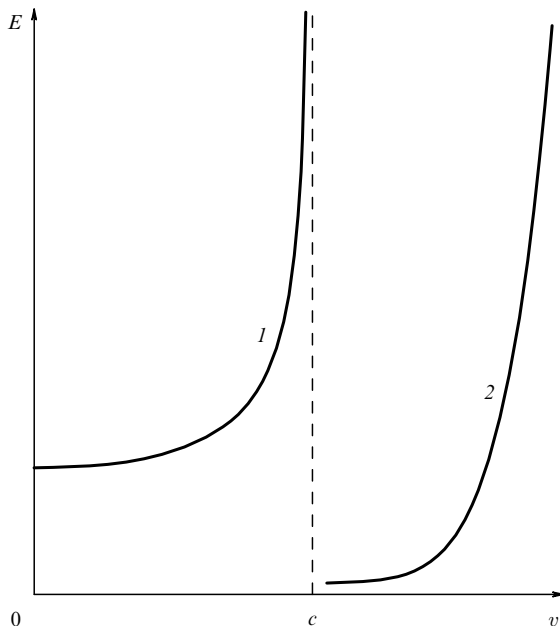


Рис. 5. Зависимость энергии E различных солитонов от их скорости v : 1 — для кинка уравнения синус-Гордона (лоренцевская законность); 2 — для сверхзвуковых динамических солитонов (в частности, солитона в решетке Тоды).

численные эксперименты [29] показали, что в кристаллах аргона действительно наблюдается перенос тепла динамическими солитонами, близкими по своим свойствам к солитонам Тоды. По мнению авторов работы [29] перенос энергии по направлению [110] в гранцентрированном кубическом кристалле можно рассматривать как процесс, происходящий в одномерной решетке, находящейся во внешнем потенциале, созданном соседними атомами кристалла. С ростом температуры баллистический вклад в теплопроводность, обусловленный солитонами, уменьшался, в то время как диффузионный (фононный) вклад увеличивался.

Роль солитонов в переносе тепла в кристаллах исследовалась не только в численных, но и в реальных экспериментах. Нараянамурти и Варма [30] экспериментально исследовали распространение импульсов тепла в кристалле фторида натрия (NaF) по направлению [100] при температурах от 1,4 до 4,2 К. Этот температурный диапазон соответствует баллистическому режиму теплопроводности. Если энергия импульса превышала некоторый критический порог, наблюдалось формирование солитона из теплового импульса. Амплитуда солитона росла при увеличении энергии импульса, а ширина уменьшалась.

Уравнение Буссинеска (13) описывает поведение различных физических систем. В этой статье мы не будем рассматривать его применение в гидродинамике, описанное во множестве работ. Однако уравнение Буссинеска также описывает динамику других объектов, например, углеродных нанотрубок [31]. Эти структуры близки по своим свойствам к фуллеренам. В настоящее время углеродные нанотрубки считаются очень перспективным материалом для практического применения в нанотехнологии. В частности, изучается возможность использования их для создания наномасштабных электронных устройств. Одностенная углеродная нанотрубка представляет собой цилиндрическую двумерную поверхность, образованную атомами углерода. Гексагональная структура поверхности близка к структуре атомной плоскости (001) в кристалле графита, однако длины межатомных связей и углы между ними несколько отличаются от соответствующих характеристик графита из-за деформации, вызванной сворачиванием плоскости в цилиндр. В работе Астаховой и др. [31] показано, что продольные смещения атомов углерода в нанотрубке (т.е. смещения, параллельные оси цилиндра) описываются уравнением Буссинеска. Таким образом, вдоль трубки могут распространяться сверхзвуковые деформационные солитоны, что подтверждено численным моделированием [31]. Возможно, исследование этих солитонов позволит объяснить anomalously высокие теплоемкость и теплопроводность нанотрубок. Большой интерес представляет также изучение влияния солитонов на оптико-механические и механо-электрические явления в нанотрубках.

При изучении солитонов в решетке Тоды возникает естественный вопрос: возможны ли сверхзвуковые солитоноподобные решения в одномерных цепочках с другими потенциалами межатомного взаимодействия $V(r)$? Эта проблема была исследована в работе Коллинза [32]. Запишем уравнения движения для цепочки атомов (10) в более общем виде:

$$M \partial_t^2 \rho_n = \partial_\rho [V(\rho_{n+1}) + V(\rho_{n-1}) - 2V(\rho_n)]. \quad (16)$$

Предположим, что в данной цепочке распространяется солитоноподобная волна

$$\rho_n(t) = \rho(na - vt) = \rho(\zeta),$$

форма которой медленно меняется с ростом n . Используя разложение в ряд Тейлора, можно получить следующее соотношение для произвольной функции $f(n)$:

$$\begin{aligned} f(n+1) + f(n-1) - 2f(n) &= \\ &= \left[\exp\left(\frac{d}{dn}\right) + \exp\left(-\frac{d}{dn}\right) - 2 \right] f(n) = \\ &= \left[2\sinh\left(\frac{1}{2} \frac{d}{dn}\right) \right]^2 f(n). \end{aligned}$$

Тогда уравнение (16) можно записать в виде

$$M \frac{v^2}{a^2} \frac{d^2 \rho(\zeta)}{dn^2} = \left[2\sinh\left(\frac{1}{2} \frac{d}{dn}\right) \right]^2 \partial_\rho V(\rho).$$

Отсюда получаем

$$M \frac{v^2}{a^2} \frac{d^2}{dn^2} \left[\frac{1}{2} \operatorname{cosech}\left(\frac{1}{2} \frac{d}{dn}\right) \right]^2 \rho(\zeta) = \partial_\rho V(\rho).$$

Заменяя функцию в квадратных скобках на ее разложение в ряд Тейлора и пренебрегая слагаемыми более высокого порядка малости, чем $d^2\rho/dn^2$, получаем

$$M \frac{v^2}{a^2} \left(\rho - \frac{1}{12} \frac{d^2 \rho}{dn^2} \right) = \partial_\rho V(\rho).$$

Проинтегрировав это уравнение, получаем

$$\frac{Mv^2}{24a^2} \left(\frac{d\rho}{dn} \right)^2 = \frac{Mv^2}{2a^2} \rho^2 - V(\rho) + V(0). \quad (17)$$

Используя разложение потенциала $V(\rho)$ в ряд Тейлора

$$V(\rho) - V(0) = \frac{1}{2} \partial_\rho^2 V(0) \rho^2 + \frac{1}{6} \partial_\rho^3 V(0) \rho^3 + \dots,$$

запишем уравнение (17) в виде

$$\frac{Mv^2}{24a^2} \left(\frac{d\rho}{dn} \right)^2 = \frac{M}{2a^2} (v^2 - c^2) \rho^2 - \frac{1}{6} \partial_\rho^3 V(0) \rho^3 - \dots, \quad (18)$$

где $c = a[\partial_\rho^2 V(0)/M]^{1/2}$ — скорость звука. Это уравнение позволяет сделать следующий вывод: если потенциал межатомного взаимодействия характеризуется более сильным отталкиванием, чем гармонический, в данной системе возможны солитоноподобные сверхзвуковые волны сжатия. Этот вывод следует из условия неотрицательности величины $(d\rho/dn)^2$ и требования $\rho \rightarrow 0$ при $\zeta \rightarrow \pm\infty$. Волны растяжения при этом неустойчивы.

Простейшим частным случаем обсуждаемого класса систем является известная цепочка Ферми–Пасты–Улама (ФПУ), численное исследование которой дало толчок современному развитию теории солитонов. Позже различные авторы аналитически исследовали распространение солитонов в этой цепи при различных потенциалах межатомного взаимодействия. Так, Пневматикос [33] исследовал сверхзвуковые динамические солитоны в одномерной цепочке частиц, связанных

полиномиальным потенциалом взаимодействия. В континуальном приближении динамика этой цепочки описывается модифицированным уравнением Буссинеска

$$\partial_t^2 \varphi - \partial_x^2 (c^2 \varphi + B\varphi^3 - h\partial_x^2 \varphi) = 0, \quad (19)$$

где $\varphi \equiv \partial_x u$. Солитонное решение этого уравнения, соответствующее скорости движения v , имеет вид

$$u = \pm 2 \left(-\frac{2h}{B} \right)^{1/2} \arctan \left\{ \exp \left[\frac{2}{L} (x - vt) + x_0 \right] \right\}, \quad (20)$$

где ширина солитона

$$L = 2 \left(\frac{h}{c^2 - v^2} \right)^{1/2}. \quad (21)$$

Солитоны (20) могут быть как дозвуковыми ($v < c$), так и сверхзвуковыми ($v > c$), в зависимости от знака дисперсионного параметра h .

Другая модификация уравнения Буссинеска была предложена в работах Балабаева и др. [34, 35] для описания нелинейной динамики полимерной молекулы, находящейся в конформации плоского транс-зигзага (рис. 6). Авторы работ [34, 35] исследовали динамику молекулы полиэтилена в приближении объединенных атомов. При переходе к континуальному пределу полученное ими уравнение относительно продольного смещения полимерной цепи u принимает вид

$$\partial_t^2 u - c^2 \left(\partial_x^2 u + \frac{3s^2}{n^2} \partial_x u \partial_x^2 u + \frac{s^2 l^2}{3} \partial_x^4 u \right) - \frac{s^4 l^2}{4n^2} \partial_t^2 \partial_x^2 u = 0, \quad (22)$$

где c — скорость звука, l — длина валентной связи (эти связи считаются нерастяжимыми), $s = \sin(\theta_0/2)$, $n = \cos(\theta_0/2)$, θ_0 — равновесное значение валентного угла.

В работах [34, 35] было найдено солитонное решение уравнения (22):

$$u = \frac{d}{2} \{ 1 + \tanh[k(x - vt)] \}, \quad (23)$$

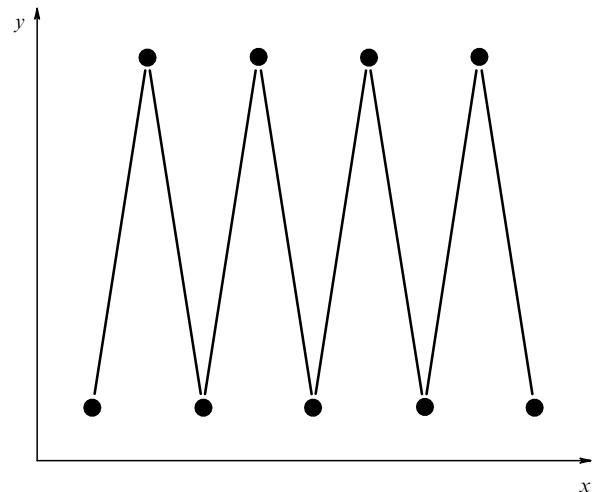


Рис. 6. Схематическое изображение полимерной цепи в конформации плоского транс-зигзага.

где v — скорость солитона, k определяет обратную ширину солитона, d — смещение цепи после прохождения солитона. Параметры v и k должны удовлетворять условиям

$$k^2 + \frac{2n^2}{s^2 d} \left(\frac{4n^2}{3s^2} + 1 \right) k - \frac{n^2}{l^2 s^4} = 0,$$

$$v^2 = c^2 \left(1 + \frac{s^2 d}{2n^2} k \right).$$

Таким образом, солитон (23) является сверхзвуковым. Такие солитоны переносят механические возбуждения вдоль изолированной молекулы полиэтилена. При исследовании полимерных кристаллов возникает естественный вопрос: как трансформируются свойства солитона (23) при включении этой молекулы в трехмерный кристалл полиэтилена? Ответ на этот вопрос будет дан в разделе 2.3 при рассмотрении сверхзвуковых топологических солитонов.

Проблема сверхзвукового движения солитонов в молекулах полиэтилена рассматривалась также в работах Маневича и Савина [36, 37]. Для описания динамики зигзагообразной полимерной цепи в этих работах был предложен следующий лагранжиан:

$$L = \sum_n \left[\frac{1}{2} M (\partial_t u_n)^2 + \frac{1}{2} M (\partial_t v_n)^2 - V(\rho_n) - U(\theta_n) \right], \quad (24)$$

где $M = 14m_p$ — масса звена цепи, m_p — масса протона, u_n и v_n — соответственно продольное и поперечное смещения n -го звена из положения равновесия, потенциал n -й валентной связи (т.е. связи между соседними атомами углерода)

$$V(\rho_n) = D_0 \{ 1 - \exp [-\alpha(\rho_n - \rho_0)] \}^2,$$

ρ_n — длина n -й валентной связи, $\rho_0 = 0,153$ нм — равновесная величина этой связи, потенциал n -го валентного угла (т.е. угла, образованного двумя валентными связями) θ_n

$$U(\theta_n) = \frac{\gamma}{2} (\cos \theta_n - \cos \theta_0)^2,$$

$\theta_0 = 113^\circ$ — равновесная величина валентного угла. В работах [36, 37] использовались следующие значения параметров потенциалов: $D_0 = 334,72$ кДж моль $^{-1}$, $\alpha = 19,1$ нм $^{-1}$, $\gamma = 130,122$ кДж моль $^{-1}$.

Сверхзвуковые динамические солитоны данной модели были исследованы численно. Оказалось, что в данной системе существуют сверхзвуковые солитоны с конечным спектром скоростей $c < v \leq c_1$, где $c = 1$ — безразмерная скорость продольных звуковых волн в молекуле полиэтилена, v — безразмерная скорость солитона, $c_1 = 1,0203$. В области локализации солитона происходит продольное растяжение и поперечное сжатие молекулярной цепи. С увеличением скорости солитона его энергия и амплитуда монотонно растут, а ширина уменьшается. При $v = c_1$ энергия солитона $E = 4,6$ эВ, ширина $R = 0,53$ нм. Численное моделирование показало, что при всех скоростях из диапазона $c < v \leq c_1$ солитон динамически устойчив. Существование верхней границы спектра скоростей сверхзвуковых солитонов в

молекуле полиэтилена (скорости c_1) и точное значение этой скорости являются результатами численных экспериментов. Связь скорости c_1 с параметрами модели пока теоретически не исследована.

Большинство авторов, исследовавших свойства солитонов (в том числе сверхзвуковых) в одномерных системах, ограничивались рассмотрением самого простого случая — взаимодействия только между ближайшими соседями в одномерной цепи. Однако в реальных физических системах могут реализоваться и более сложные виды взаимодействий. Свойства солитонов в одномерной цепи, в которой взаимодействие не ограничено ближайшими соседями, были изучены в работе Ремуасана и Флитзаниса [38]. Они рассматривали цепочку атомов массы m с постоянной решетки a . Гамильтониан этой цепи имел вид

$$H = \frac{1}{2} \sum_i [m(\partial_t u_i)^2 + W_i] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}(u_i - u_j)^2,$$

где потенциал

$$W_i = \frac{G}{2} (u_i - u_{i-1})^2 + \frac{A}{3} (u_i - u_{i-1})^3$$

характеризует взаимодействие между ближайшими соседями, а потенциал

$$V_{ij} = \frac{J}{2} (1 - r) r^{|i-j|-1}$$

— дальние взаимодействия в системе. Здесь J — постоянная, величина r ($0 \leq r < 1$) характеризует радиус взаимодействия: при $r = 0$ цепь превращается в систему, в которой взаимодействуют только ближайшие соседи, при $r \rightarrow 1$ радиус взаимодействия атомов становится бесконечно большим. Используя обозначение $\varphi \equiv \partial_x u$ и пренебрегая производными высокого порядка, Ремуасан и Флитзанис [38] получили в континуальном приближении следующее уравнение движения (обобщенное уравнение Буссинеска):

$$\partial_t^2 \varphi - \partial_x^2 [c^2(r)\varphi - p\varphi^2 - h(r)\partial_x^2 \varphi - f(r)\partial_t^2 \varphi] = 0, \quad (25)$$

где скорость звука

$$c(r) = \left[\frac{1+r}{(1-r)^2} J' + G' \right]^{1/2} a,$$

$$J' = \frac{J}{m}, \quad G' = \frac{G}{m}, \quad p = 2A'a^3, \quad A' = \frac{A}{m},$$

$$h(r) = \left[\frac{1+r}{(1-r)^2} J' + G' \right] \frac{a^4}{12} - \frac{ra^4}{(1-r)^2} G',$$

$$f(r) = \frac{ra^2}{(1-r)^2}.$$

Уравнение (25) имеет солитонное решение

$$\varphi(x, t) = B(r) \operatorname{sech}^2 \frac{x - vt}{L(r)}, \quad (26)$$

где амплитуда солитона

$$B(r) = \frac{3}{2p} [v^2 - c^2(r)],$$

ширина солитона

$$L(r) = 2 \left[\frac{h'(r)}{v^2 - c^2(r)} \right]^{1/2},$$

$h'(r) = h(r) + f(r)v^2$. При $r = 0$ уравнение (25) превращается в уравнение Буссинеска (13), а солитон (26) — в солитонное решение уравнения Буссинеска (14). В пределе $r \rightarrow 1$, когда радиус взаимодействия атомов стремится к бесконечности, ширина солитона становится бесконечной, а его амплитуда стремится к нулю.

Важной особенностью рассматриваемой модели является то, что она допускает существование как дозвуковых, так и сверхзвуковых солитонов. В системе, описываемой уравнением Буссинеска, это невозможно. При $h'(r) > 0$ солитоны являются сверхзвуковыми ($v^2 > c^2(r)$). Если $p > 0$, они представляют собой области растяжения, если $p < 0$ — области сжатия. При $h'(r) < 0$ солитоны распространяются с дозвуковыми скоростями. В этом случае должно выполняться условие

$$v^2 < G'a^2 - \frac{(1-r)^2}{12r} c^2(r).$$

Таким образом, в дозвуковом диапазоне существует "щель" (область запрещенных скоростей), разделяющая сверхзвуковую и дозвуковую части спектра скоростей солитонов. Когда радиус взаимодействия атомов r уменьшается, ширина щели увеличивается, пока она не займет всю дозвуковую область.

Простым обобщением рассмотренных в этом разделе нелинейных цепей является одномерная зернистая среда, т.е. цепочка макроскопических упругих гранул. Нестеренко [39] впервые теоретически показал, что в такой системе существуют динамические сверхзвуковые солитоны, и исследовал их поведение в численных экспериментах. Позже Лазариди и Нестеренко [40] наблюдали эти солитоны в реальных экспериментах. В качестве одномерной зернистой среды использовалась цепочка стальных шариков диаметром 4,75 мм. Один из концов цепочки опирался на жесткую стенку, а по другому производился удар. Начальное возмущение, созданное ударом, быстро распалось на несколько солитонов. Косте и др. [41] также наблюдали такие солитоны в цепочке сферических гранул. В этих экспериментах использовались шарики, изготовленные из различных материалов: стали, бронзы, карбида вольфрама и т. д. В частности, в цепочке стальных шариков наблюдались солитоны со скоростью 1000 м с⁻¹ и шириной 3–4 см (т.е. 4–5 гранул). Экспериментальные результаты Косте и др. [41] хорошо согласуются с теоретическими предсказаниями Нестеренко [39].

Исследование солитонов в зернистых средах важно не только с фундаментальной, но и с практической точки зрения. В частности, изучение распространения акустических импульсов в почве важно для понимания процессов, происходящих при землетрясениях, а также для защиты зданий от землетрясений. Зернистые материалы используются в технике, например, в качестве демпферов.

Изучение солитонов в зернистых средах приводит к выводу о существовании тесной взаимосвязи между сверхзвуковыми динамическими солитонами и ударными волнами. Действительно, распад ударной волны на несколько солитонов наблюдался не только в экспе-

риментах Лазариди и Нестеренко [40]. Так, Беттех и Пауэлл [42] провели ряд численных экспериментов по распространению ударных волн в одномерной цепочке частиц с экспоненциальным потенциалом взаимодействия Морзе. Гамильтониан цепочки имел вид

$$H = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N (\partial_t u_i)^2 + D \sum_{i=2}^N \{ \exp [\alpha (u_{i-1} - u_i)] - 1 \}^2,$$

где u_i — смещение i -й частицы массы m из положения равновесия, D и α — постоянные. Эта цепочка близка по своим свойствам к цепочке Тоды. Беттех и Пауэлл [42] обнаружили, что при распространении ударной волны в термализованной цепочке позади фронта формируются сверхзвуковые солитоны сжатия с различными скоростями. Различие скоростей солитонов приводит к уширению фронта ударной волны и не позволяет установиться стационарному профилю. В случае первоначально не термализованной цепочки амплитуды и скорости всех солитонов позади фронта стремились к одним и тем же постоянным значениям. Пейрар и др. [43] обнаружили сходное явление при молекулярно-динамическом моделировании² детонации в двумерном кристалле нитрометана. Они наблюдали режим детонации, в котором фронт ударной волны превращался в цепочку солитоноподобных возбуждений, скорости которых уменьшались с увеличением расстояния от фронта. Такое различие в скоростях приводило к постоянному уширению фронта ударной волны по мере ее движения. Распад ударной волны на отдельные солитоны объясняется тем, что в данных нелинейных системах именно солитоны являются устойчивыми элементарными возбуждениями. Поэтому неустойчивое возмущение произвольной формы (в частности, ударная волна) в конечном итоге распадается на солитоны, дальнейшего разрушения которых уже не происходит.

Очевидно, что упругие стержни близки по своим свойствам к одномерным цепочкам. Поэтому можно ожидать, что динамика стержней описывается сходными нелинейными уравнениями, и эти уравнения также обладают солитонными решениями. Действительно, соответствующие уравнения были получены, найдены их солитонные решения. Подробные обзоры работ, посвященных солитонам в упругих стержнях (а также в пластинах и оболочках), содержатся в монографиях [44, 45]. Мы рассмотрим работу Самсонова и др. [46], поскольку они не только теоретически описали динамические солитоны в стержнях, но и наблюдали их экспериментально.

Для описания нелинейной динамики упругого цилиндрического стержня (акустического волновода) в работе [46] была предложена следующая модификация уравнения Буссинеска:

$$\partial_t^2 u - c_1^2 \partial_x^2 u = \frac{1}{2} \partial_x^2 \left[\frac{\beta}{\rho} u^2 + v^2 R^2 (\partial_t^2 u - c_t^2 \partial_x^2 u) \right], \quad (27)$$

где u — продольные смещения частиц стержня, $c_1 = (E/\rho)^{1/2}$ — скорость продольных звуковых волн в

² Напомним, что методом молекулярной динамики обычно называют численный метод решения физических задач при помощи моделирования частиц (атомов, молекул), составляющих исследуемую систему.

стержне, ρ — плотность материала, $E = 2\mu(1 + \nu)$ — модуль Юнга, μ — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, $c_t = (\mu/\rho)^{1/2}$ — скорость поперечных звуковых волн, β — коэффициент нелинейности материала, R — радиус поперечного сечения стержня. При выводе уравнения (27) предполагалось, что деформации малы, а характерная длина волны значительно превышает радиус стержня. Тогда сечения стержня при деформировании остаются плоскими, а его боковая поверхность свободна от радиальных напряжений. Уравнение (27) имеет солитонные решения

$$u_k(x, t) = D_k + A_k \operatorname{sech}^2 \frac{x - v_k t}{L_k}, \quad (28)$$

где $k = 1, 2$, $D_1 = 0$, $D_2 = -2/3A_2$, A_k — амплитуда солитона, квадрат скорости солитона

$$v_k^2 = c_t^2 \pm \frac{A_k \beta}{3\rho}, \quad (29)$$

квадрат ширины солитона

$$L_k^2 = 2v^2 R^2 \left[\frac{3(E - \mu)}{\beta A_k} \pm 1 \right]. \quad (30)$$

Верхний знак в соотношениях (29), (30) соответствует значению $k = 1$, нижний — $k = 2$. Если коэффициент нелинейности β отрицателен (таким свойством обладают, в частности, большинство металлов, кристаллы поваренной соли, полистирол), в стержне могут распространяться солитоны сжатия, если β положителен (это характерно для стекла, плавного кварца), то возможны солитоны растяжения.

Условие $L_k^2 > 0$ накладывает ограничения на спектр скоростей солитонов (28). Для решений u_1 этот спектр состоит из двух интервалов: $0 < v_1 < c_t$ и $v_1 > c_t$. Таким образом, модификация уравнения Буссинеска привела к тому, что наряду со сверхзвуковыми солитонами в том же самом стержне могут распространяться и дозвуковые нетопологические солитоны. Для решений u_2 допустимы только транззвуковые скорости $c_t < v_2 < c_l$.

Для экспериментального наблюдения динамических солитонов Самсонов и др. [46] использовали цилиндрический стержень из полистирола диаметром 1 см и длиной 5,5 см. Стержень был погружен в воду. Солитоны в образце возбуждались при воздействии нефокусированного импульса от рубинового лазера на алюминированное зеркало, расположенное в воде непосредственно перед входным торцом образца. Для измерения характеристик солитонов использовался голографический интерферометр, регистрировавший изображения стержня. Амплитуда солитона измерялась по смещению полос в интерференционной картине. При прохождении по стержню солитона сжатия происходило пуассоновое расширение боковой поверхности стержня. В результате в окружающей стержень жидкости возбуждались конические волны (так называемые пуассоновы волны). Наблюдение за этими волнами позволило измерить скорость солитона. Ширина солитона измерялась непосредственно по фотографиям.

Используя эту установку, Самсонов и др. [46] наблюдали распространение в образце солитонов сжатия и измерили их характеристики. В частности, они обнаружили солитон, ширина которого $L = 8$ мм, скорость

$v = 2400$ м с⁻¹. Измеренные авторами работы [46] параметры солитонов оказались в удовлетворительном согласии с их теоретическими предсказаниями. Позже Самсонов и др. [47] теоретически исследовали распространение солитонов в стержне переменного диаметра и экспериментально наблюдали солитоны в таком образце.

Недавно Шарон и др. [48] экспериментально обнаружили новый класс динамических солитонов при исследовании движения трещин в стекле. При прохождении трещины через локальную неоднородность материала на фронте трещины возбуждались локализованные волны. Они распространялись на значительное расстояние без заметного изменения амплитуды, имели хорошо определенную форму, не зависящую от условий их возбуждения. После столкновения эти волны сохраняли свою форму и амплитуду, испытывая только фазовый сдвиг. Это позволило Шарону и др. [48] сделать вывод о солитонной природе таких волн. Их скорость близка к скорости волн Рэлея.

2.3. Сверхзвуковые топологические солитоны

К настоящему времени хорошо изучены различные нетопологические солитоны в квазиодномерных цепочках атомов. Если разместить несколько таких цепей на небольшом расстоянии друг от друга, образуется сильно анизотропный кристалл. Примерами таких кристаллов являются полимерные кристаллы, состоящие из параллельных макромолекул. В связи с этим возникает естественный вопрос: как трансформируются при этом нетопологические солитоны? В трехмерной системе они приобретают топологический заряд, принимающий лишь дискретные значения. Действительно, каждый динамический солитон смещает цепь на некоторую величину. В изолированной цепи это смещение может быть произвольным. Но в кристалле суммарное смещение, вызванное солитоном (или группой солитонов), должно быть кратным постоянной решетки. Это необходимо для того, чтобы цепь, несущая солитон, "встроилась" в кристалл. С удалением от топологического солитона (дефекта) структура кристаллической решетки должна асимптотически приближаться к идеальной (бездефектной) структуре. Таким образом, приобретение группой динамических солитонов топологического заряда накладывает ограничения на смещения, созданные этими солитонами. В некоторых случаях эти ограничения приводят к формированию дискретного спектра скоростей солитона. Однако ниже в этом разделе будет показано, что солитоны некоторых типов имеют непрерывный спектр скоростей.

Но сохранится ли после такой трансформации возможность сверхзвукового движения этих, теперь уже топологических, солитонов? Положительный ответ на этот вопрос был дан в работах Балабаева и др. [34, 35], в которых показано, что в трехмерной системе слабо связанных полимерных цепей (другими словами, в полимерном кристалле) формируется связанное состояние нескольких динамических солитонов, обладающее топологическим зарядом. Эта группа солитонов движется со сверхзвуковой скоростью, как и нетопологические солитоны в изолированных полимерных цепях. Несколько ранее аналогичные результаты были получены Савиным [49] для одномерной цепи на подложке. Ниже мы рассмотрим эти случаи подробнее.

Если отдельные полимерные цепи, образующие кристалл, слабо связаны между собой, то после приобретения группой динамических солитонов топологического заряда сохраняется возможность локализации солитона преимущественно на одной цепи. В этом случае реалистической оказывается уже простейшая модель, в которой слабо возбужденные цепи, окружающие сильно возбужденную цепь с солитоном, заменяются внешним потенциалом — так называемой "подложкой". В этом приближении выполнено подавляющее большинство работ, посвященных исследованию топологических солитонов. Как правило, при этом учитывается лишь взаимодействие цепи с подложкой, но не внутрицепной ангармонизм. Тогда задача сводится к интегрированию нелинейного уравнения Клейна–Гордона, наиболее изученными частными случаями которого являются обсуждавшееся выше уравнение синус-Гордона и уравнение φ^4 . Локализованные решения этих уравнений в виде топологических солитонов, в полном соответствии с обсуждаемой в настоящей статье аналогией, имеют непрерывный спектр скоростей в дозвуковой области. Однако одновременный учет внутрицепного ангармонизма может принципиально изменить ситуацию.

Впервые возможность сверхзвукового движения топологического солитона была продемонстрирована в работе Косевича и Ковалева [50]. Они рассматривали модель Френкеля–Конторовой с учетом ангармоничности межатомного взаимодействия. В континуальном приближении уравнение движения цепи имеет вид

$$m\partial_t^2 u = mc^2 \left[\partial_x^2 u + \frac{a^2}{12} \partial_x^4 u + \frac{\pi^2}{2} (\partial_x u)^2 \partial_x^2 u \right] - \frac{2\pi}{a} U_0 \sin \frac{2\pi u}{a}, \quad (31)$$

где m, c, a, U_0 — постоянные величины. Решением этого уравнения является кинк, движущийся со скоростью v :

$$u = \frac{2a}{\pi} \arctan \exp \left(-\frac{x-vt}{L_K} \right), \quad (32)$$

где ширина кинка L_K является решением следующего биквадратного уравнения:

$$48\pi^2 U_0 L_K^4 + 12ma^2(v^2 - c^2)L_K^2 - mc^2 a^4 = 0. \quad (33)$$

Зависимость ширины солитона L_K от его скорости v , вытекающая из этого уравнения, описывается довольно громоздкой формулой, которую мы не будем здесь приводить. График функции $L_K(v)$ показан на рис. 7 (кривая 3). Интересно отметить, что уравнение (31) является "объединением" двух уравнений: уравнения синус-Гордона (последнее можно получить из (31), если отбросить второе и третье слагаемое в правой части) и модифицированного уравнения Буссинеска (его можно получить из (31), если убрать подложку, т.е. положить $U_0 = 0$). Соответственно, солитон Косевича–Ковалева (32) соединяет в себе свойства кинка уравнения синус-Гордона и сверхзвуковых динамических солитонов, рассмотренных в разделе 2.2. Действительно, рассмотрим два предельных случая. Если взаимодействие ангармонической цепи с подложкой является сильным, т.е. $U_0 \gg mc^2$, то последним слагаемым в левой части уравнения (33) можно пренебречь. Тогда зависимость

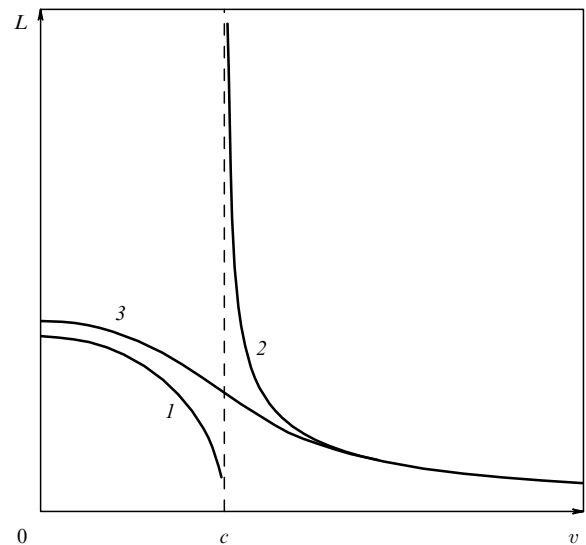


Рис. 7. Зависимость ширины L различных солитонов от их скорости v : 1 — для кинка уравнения синус-Гордона (лоренцевская закономерность); 2 — для сверхзвуковых динамических солитонов (в частности, солитонного решения модифицированного уравнения Буссинеска); 3 — для солитона Косевича–Ковалева.

ширины солитона от его скорости описывается известным лоренцевским законом:

$$L_L = \frac{a}{2\pi} \sqrt{\frac{m}{U_0}} \sqrt{c^2 - v^2}.$$

Эта зависимость показана на рис. 7 (кривая 1).

Второй предельный случай соответствует свободной цепи, не взаимодействующей с подложкой. Тогда $U_0 = 0$, и в левой части уравнения (33) остаются второе и третье слагаемое. В результате получаем зависимость ширины солитона от скорости:

$$L_B = \frac{ac}{2\sqrt{3(v^2 - c^2)}}. \quad (34)$$

График функции $L_B(v)$ показан на рис. 7 (кривая 2). Формула (34) для $L(v)$ отличается от аналогичного выражения для ширины (15) солитона уравнения Буссинеска постоянным числовым множителем.

Таким образом, функция $L_K(v)$ для топологического солитона Косевича–Ковалева представляет собой "сшивку" двух решений: лоренцевской функции $L_L(v)$ для дозвуковых топологических солитонов и функции $L_B(v)$ для сверхзвуковых динамических солитонов. Интересно отметить, что "предельные решения" $L_L(v)$ и $L_B(v)$ обладают противоположным поведением при приближении скорости солитона к скорости звука: в этом случае ширина дозвукового кинка стремится к нулю, а ширина сверхзвукового динамического солитона — к бесконечности. Ширина солитона Косевича–Ковалева $L_K(v)$, соответствующая "сшивке" решений $L_L(v)$ и $L_B(v)$, остается ненулевой и конечной при $v = c$ и асимптотически стремится к нулю при $v \rightarrow \infty$. Этот солитон обладает непрерывным спектром скоростей в диапазоне от нуля до бесконечности. Скорость звука для солитона Косевича–Ковалева (32) вообще не является особой точкой. Разумеется, при достаточно большой скорости этот солитон

становится настолько узким, что его ширина оказывается величиной того же порядка, что и постоянная решетки. В таком случае континуальное приближение становится неприменимым, и вместо уравнения (31) для описания динамики цепочки необходимо использовать другое уравнение, учитывающее дискретную структуру системы. Но при условии, что взаимодействие между атомами цепи значительно сильнее, чем их взаимодействие с подложкой, т.е. $U_0 \ll mc^2$, континуальное приближение остается справедливым и при достаточно высоких скоростях в сверхзвуковой области.

Солитон Косевича–Ковалева имеет непрерывный спектр скоростей в сверхзвуковой области благодаря тому обстоятельству, что оба "предельных случая" уравнения (31) — уравнение синус-Гордона и модифицированное уравнение Буссинеска — имеют солитонные решения в форме одной и той же функции (32), отличающиеся только видом зависимости $L(v)$. Ниже будет показано, что трансформация динамического солитона в топологический при размещении одномерной атомной цепи в кристаллическом окружении имеет место и для других цепей, с другими внутрицепными взаимодействиями. Но в тех случаях, когда "предельные уравнения" (т.е. уравнения для дозвукового топологического и сверхзвукового динамического солитонов) имеют решения, описываемые различными функциями, спектр скоростей сверхзвукового топологического солитона становится дискретным. Можно ожидать, что аналогичная "сшивка" дозвуковых и сверхзвуковых солитонных решений имеет место и для других уравнений, в том числе и для тех, решения которых не удается представить в элементарных функциях.

Косевич и Ковалев [50] рассмотрели еще одну модификацию модели Френкеля–Конторовой, включив в потенциал взаимодействия атомов кубический член. Потенциал взаимодействия с подложкой в этом случае был выбран в полиномиальной форме. Уравнение движения цепи приняло вид

$$m\partial_t^2 u = mc^2 \left(\partial_x^2 u + \frac{a^2}{12} \partial_x^4 u - 3\beta \partial_x u \partial_x^2 u \right) - \frac{2U_0}{a^4} u(a-u)(a-2u). \quad (35)$$

Это уравнение описывает, в частности, динамику бистабильной молекулярной цепи, т.е. цепи, обладающей двумя стабильными равновесными состояниями. Уравнение (35) имеет солитонное решение

$$u = a \left[\exp \frac{3\beta(x-vt)}{a} + 1 \right]^{-1}. \quad (36)$$

Характерной особенностью этого солитона является то, что он может двигаться только с одной скоростью $v = v_0$:

$$v_0 = c \left(1 + \frac{3\beta^2}{4} - \frac{2U_0}{9\beta^2 mc^2} \right)^{1/2}.$$

При условии, что $\beta^4 > 8U_0/27mc^2$, эта скорость становится сверхзвуковой. Для солитона (36) скорость звука не является выделенной. Он может двигаться с указанной скоростью, обладая при этом конечной энергией. Ниже мы приведем другие примеры, свидетельствующие, что

существование дискретного спектра скоростей является общим свойством многих сверхзвуковых топологических солитонов.

Позже эту модель исследовал Савин [49], используя модифицированный потенциал подложки. Уравнение (35) после этой модификации приняло вид

$$(1-v^2)\partial_\zeta^2 u + \frac{1}{12}\partial_\zeta^4 u - 3\beta\partial_\zeta u \partial_\zeta^2 u - 4Gu(u^2-1) = 0, \quad (37)$$

где $\zeta = x - vt$ и используется система единиц, в которой $a = 1$, $c = 1$, $m = 1$. В пределе $G \rightarrow 0$ уравнение (37) после одного интегрирования переходит в уравнение Буссинеска

$$\frac{1}{12}\partial_\zeta^2 \varphi + (1-v^2)\varphi - \frac{3\beta}{2}\varphi^2 = 0,$$

где $\varphi \equiv \partial_\zeta u$. Напомним, что решением этого уравнения является сверхзвуковой акустический солитон, движущийся со скоростью v ,

$$\varphi = \beta^{-1}(1-v^2)\operatorname{sech}^2 q\zeta, \quad (38)$$

где обратная ширина солитона $q = [3(v^2-1)]^{1/2}$. При наличии подложки этот солитон приобретает топологический заряд

$$Q(v) = u(+\infty) - u(-\infty) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\zeta) d\zeta = - \left[\frac{4(v^2-1)}{3\beta^2} \right]^{1/2} = -1. \quad (39)$$

Данное соотношение фиксирует скорость сверхзвукового солитона. Формула (39) справедлива и при наличии в цепи N одинаковых акустических солитонов. Тогда она принимает вид

$$NQ(v_N) = -1.$$

Из этого уравнения следует, что скорость каждого акустического солитона

$$v_N = \left[1 + \frac{3}{4} \left(\frac{\beta}{N} \right)^2 \right]^{1/2}.$$

Таким образом, Савин [49] показал, что в пределе $G \rightarrow 0$ топологический солитон модели Френкеля–Конторовой с кубическим ангармонизмом межатомного взаимодействия обладает конечным дискретным сверхзвуковым спектром скоростей, для которого скорость звука является точкой сгущения.

Савин [49] численно исследовал динамику топологических солитонов в данной цепи при малой высоте потенциального барьера $G = 10^{-3}$. Численное моделирование показало, что топологический солитон всегда имеет непрерывный дозвуковой спектр значений скорости $0 \leq v \leq v_0 < 1$. С ростом параметра ангармонизма β верхняя граница непрерывного спектра стремится к скорости звука: $v_0 \rightarrow 1$ при $\beta \rightarrow \infty$. Численное моделирование подтвердило, что солитон имеет конечный дискретный сверхзвуковой спектр скоростей $v = v_n$, $n = 1, \dots, N$, где $v_1 > \dots > v_N > 1$. Число допустимых сверхзвуковых значений скорости N и сами значения

скоростей v_n монотонно растут с ростом параметра ангармонизма β .

Решение (38), полученное в континуальном приближении, не является точным для солитона в дискретной цепи. Поэтому реальные значения сверхзвуковых скоростей (\bar{v}_n) отличаются от расчетных (v_n). Поскольку ширина сверхзвукового солитона уменьшается с ростом его скорости, одновременно уменьшается и точность результатов, полученных в рамках континуального приближения. Поэтому разность $\Delta v_n = v_n - \bar{v}_n$ растет с удалением скорости v_n от скорости звука. Когда скорость сверхзвукового кинка $v > \bar{v}_n$, его движение сопровождается излучением фононов, что приводит к торможению солитона. При скорости $v = \bar{v}_n$ излучение исчезает, и кинк движется с этой постоянной скоростью. В цепи без подложки ($G = 0$) кинк распадается на n несвязанных акустических солитонов и дозвуковое фононное излучение.

Позже Золотарюк и др. [51] численно исследовали поведение топологических солитонов в модели "цепочка Тоды на подложке". Эта модель, как и модель Косевича–Ковалева, является модификацией модели Френкеля–Конторовой с ангармоническим межатомным взаимодействием. В качестве потенциала, описывающего это взаимодействие, был выбран экспоненциальный потенциал (потенциал Тоды (9)), а в качестве потенциала подложки — синусоида. Как и в рассмотренном выше случае, спектр скоростей топологических солитонов является дискретным. Особенностью модели "цепочка Тоды на подложке" является дискретность спектра скоростей солитонов не только в сверхзвуковом, но и в дозвуковом диапазоне. Этот спектр ограничен снизу, т.е. существует минимальная скорость солитона в данной цепи. С ростом параметра ангармонизма b в потенциале (9) (при малых b) число скоростей солитонов в спектре растет, а нижняя граница спектра снижается. При $b \rightarrow \infty$ свойства солитонов в данной цепи приближаются к свойствам обычных солитонов Тоды. Браун [52] также исследовал модель Френкеля–Конторовой с экспоненциальным взаимодействием между атомами и пришел к выводу, что солитоны в такой цепи могут двигаться как со сверхзвуковыми, так и с дозвуковыми скоростями.

Сверхзвуковое движение топологического солитона в бистабильной цепи было также исследовано в работе Золотарюка и др. [53]. Они рассматривали одномерную цепочку молекул, соединенных водородными связями: $-X-H-X-H-X-H-$. Эта структура моделировалась цепочкой, состоящей из чередующихся атомов разной массы: протонов массы m и тяжелых ионов X^- массы M . Пусть $q_n = y_n/a$ — безразмерное смещение протона в n -й водородной связи, $Q_n = Y_n/a$ — безразмерное смещение иона, a — период обеих подрешеток. Введем переменные $R_n = (Q_n + Q_{n+1})/2$ — смещение центра масс ячейки, образованной n -м и $(n+1)$ -м тяжелыми ионами, $\rho_n = Q_{n+1} - Q_n$ — относительное смещение этих ионов, $u_n = q_n - R_n$ — смещение n -го протона относительно центра отрезка, соединяющего n -й и $(n+1)$ -й ионы. Цепочка свободна, т.е. на нее не действуют никакие внешние силы.

В континуальном приближении динамика солитонов в данной цепочке описывается уравнением

$$\frac{d\rho}{du} = \frac{(1-v^2)\partial\Phi/\partial u}{(v^2-s^2)\partial\Phi/\partial\rho}, \quad (40)$$

где потенциал

$$\Phi = \frac{\rho^2}{2} \left[\left(1 + \frac{1}{\mu}\right)v^2 - \left(1 + \frac{s^2}{\mu}\right) \right] + \mu\Omega_0^2 [V(u) - g_0\rho],$$

c и c_0 — скорости звука в протонной и ионной подрешетках соответственно; безразмерная скорость солитона v выражена в единицах скорости c ; $s = c_0/c$, $\mu = m/M$, $V(u)$ — потенциал взаимодействия между ионами и протонами, g_0 и Ω_0 — постоянные. В работе [53] было найдено аналитическое решение уравнения (40):

$$\frac{du_K}{d\zeta} = \pm \gamma_1 \Omega_0 [2V(u_K)]^{1/2},$$

$$\rho_K = \mp \frac{\mu\Omega_0 [2V(u_K)]^{1/2}}{\gamma_1 (s^2 - v^2)}, \quad (41)$$

где $u_K(\zeta)$ — протонная компонента солитонного решения, представляющая собой кинк (или антикинк), $\zeta = x - v\tau$, $\tau = ct/a$ — безразмерное время. Кинк удовлетворяет граничным условиям $u_K(\pm\infty) = \pm q_0$ и представляет собой отрицательный ионный дефект, антикинк соответствует противоположным граничным условиям $u_K(\pm\infty) = \mp q_0$ и представляет собой положительный ионный дефект. Цепь может находиться в одном из двух вырожденных основных состояний: $-X-N-X-N-X-N-$ или $-N-X-N-X-N-X-$. Солитоны переводят цепь из одного состояния в другое. $\pm q_0$ — локальные минимумы потенциала $V(u)$, соответствующие двум равновесным положениям протона. Величина

$$\gamma_1 = \left(\frac{1}{1-v^2} + \frac{\mu}{s^2-v^2} \right)^{1/2} \quad (42)$$

представляет собой обобщение лоренцевского фактора на случай одномерной задачи с двумя скоростями звука. При переходе к пределу "замороженных" тяжелых ионов $\mu \rightarrow 0$, и γ_1 превращается в обычный лоренцевский фактор.

Сверхзвуковые солитонные решения уравнения (40) обладают электрическим зарядом. Но все квазирелятивистские эффекты в этой задаче связаны только со скоростями звука. Таким образом, сверхзвуковое движение солитона (41) является чисто механическим эффектом. Из формулы (42) следует, что этот солитон имеет два разрешенных диапазона скоростей: дозвуковой $0 < v < s$ и сверхзвуковой (его можно также назвать трансзвуковым, поскольку он расположен между скоростями звука протонной и ионной подрешеток) $c_1 < v < 1$, где

$$c_1 = \left(\frac{s^2 + \mu}{1 + \mu} \right)^{1/2}.$$

При переходе солитона в диапазон сверхзвуковых скоростей деформация ионной подрешетки ρ_K меняет знак: кинк сопровождается локализованным сжатием ($\rho_K < 0$) в дозвуковой области и растяжением ($\rho_K > 0$) в сверхзвуковой, антикинк — наоборот: растяжением в дозвуковой и сжатием в сверхзвуковой области.

В работе [53] получен следующий результат для энергии солитона в континуальном приближении:

$$E = \left(\frac{2^{1/2}}{\gamma_1} \right)^3 mc^2 \Omega_0 \left[\frac{1}{(1-v^2)^2} + \frac{\mu s^2}{(s^2-v^2)^2} \right] \times \int_0^{q_0} [V(u)]^{1/2} du.$$

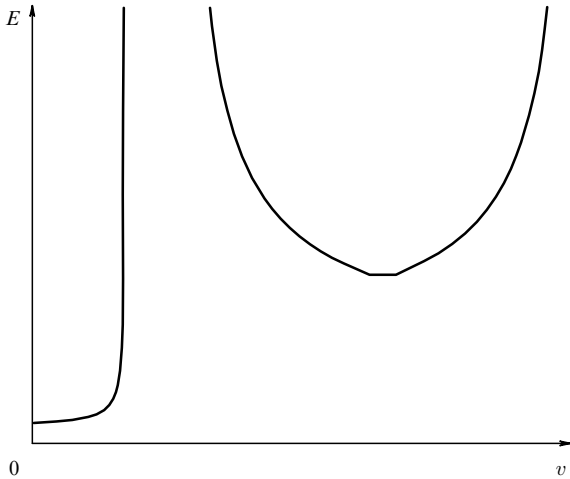


Рис. 8. Зависимость энергии топологического солитона в бистабильной цепи E от его скорости v .

Из этой формулы следует, что в дозвуковом диапазоне $0 < v < s$ энергия солитона E стремится к бесконечности при $v \rightarrow s$. В сверхзвуковом диапазоне при скоростях, близких к c_1 , энергия солитона резко уменьшается с ростом скорости. Однако при дальнейшем увеличении скорости солитона его энергия снова растет и стремится к бесконечности при $v \rightarrow 1$ (рис. 8).

В работе [53] также было исследовано дозвуковое и сверхзвуковое движение солитонов в данной системе в случае, когда потенциал V зависит не только от u , но и от ρ . При этом не учитывались эффекты, связанные с движением центров масс R_n . Однако численное моделирование движения солитонов в данной системе показало, что это приближение (названное авторами работы [53] вторым) плохо согласуется с результатами моделирования. Изложенные выше результаты, полученные в первом приближении, хорошо согласуются с данными численных экспериментов.

При моделировании Золотарюк и др. [53] использовали следующие значения параметров системы: $a = 0,276$ нм, $\mu^{-1} = 17$, $s = 0,1$. Численные эксперименты показали, что сверхзвуковое движение солитона является неустойчивым, за исключением интервала скоростей $v = 0,67 - 0,69$. Сверхзвуковые солитоны, имеющие первоначально другие скорости, движутся с переменными скоростями до тех пор, пока они либо достигают устойчивого диапазона, либо переходят в дозвуковую область. Столкновение двух сверхзвуковых солитонов приводит к их отражению, которое сопровождается сильным излучением звуковых волн. Оба солитона после столкновения переходят в дозвуковой диапазон. В случае, когда цепочка взаимодействовала с подложкой, при численном моделировании наблюдались только дозвуковые солитоны.

Исследованная в работе [53] модель описывает протонный транспорт в молекулярных системах с цепочками водородных связей. Такие цепочки встречаются в различных веществах, например во льде, в белках. Твердые тела с водородными связями не имеют свободных электронов и, следовательно, должны быть изоляторами. Тем не менее в них происходит перенос заряда благодаря протонному транспорту. Эксперименты свидетельствуют, что, если направление электрического поля

совпадает с направлением цепочки водородных связей, проводимость такого вещества оказывается на три порядка выше, чем при приложении поля в перпендикулярном направлении [54]. Протонный транспорт играет важную роль в биосистемах, в частности, в преобразовании энергии на клеточном уровне [55, 56]. В настоящее время считается, что цепочки полярных групп аминокислотных остатков трансмембранных белковых молекул образуют протонные каналы в митохондриях. Такой протонной помпой является, например, молекула бактериородопсина. В этом случае путь протонов проходит по аминокислотным остаткам, содержащим гидроксильную группу ОН.

Сверхзвуковое движение топологических солитонов в бистабильных энергетически невырожденных системах было исследовано в работах Маневича, Смирнова и др. [56–60]. В частности, в работе [59] рассмотрена квазиодномерная модель двухатомного молекулярного кристалла. Молекулы соединяются, образуя плоский транзитивный. Гамильтониан системы имеет вид

$$H = \sum_j \left[\frac{M}{2} (\partial_t u_j)^2 + \frac{m}{2} (\partial_t w_j)^2 + U(w_j - u_j) + \frac{\delta}{2} (u_{j+1} - w_j)^2 + \frac{K}{2} (u_{j+1} - u_j)^2 + \frac{k}{2} (w_{j+1} - w_j)^2 \right],$$

где M и m — массы "тяжелых" и "легких" частиц, u_j и w_j — их смещения из равновесных положений в решетке, δ , K и k — жесткости межмолекулярных связей. Внутримолекулярный потенциал U имеет два энергетически невырожденных минимума.

Введем новые переменные: смещения центров масс молекул $\chi_j = (Mu_j + mw_j)/(M + m)$, внутримолекулярные координаты $\varphi_j = w_j - u_j$, $M_t = M + m$, $\mu = Mm/M_t$, $c^2 = (\delta + K + k)/M_t$, $c_1^2 = (\delta - Km/M - kM/m)/M_t$, $\beta = [\delta(M - m)/2 + kM - Km]/M_t$, $\gamma = a\delta/6$, $\omega^2 = \delta/\mu a^2$, $h = a^2 c^2/12$, a — постоянная решетки. Тогда динамика кристалла в континуальном приближении описывается системой уравнений

$$\begin{aligned} \partial_t^2 \chi - c^2 \partial_x^2 \chi - h \partial_x^4 \chi + \frac{(\delta/a) \partial_x \varphi - \beta \partial_x^2 \varphi + \gamma \partial_x^3 \varphi}{M_t} &= 0, \\ \partial_t^2 \varphi + c_1^2 \partial_x^2 \varphi + \omega^2 \varphi + \frac{(\partial_\varphi U/a^2) - (\delta/a) \partial_x \chi - \beta \partial_x^2 \chi - \gamma \partial_x^3 \chi}{\mu} &= 0. \end{aligned}$$

Решением этой системы, как показано в [59], является сверхзвуковой топологический солитон, движущийся со скоростью v :

$$\begin{aligned} \varphi &= \varphi_k \frac{1 - \tanh(\zeta/d)}{2}, \\ \partial_\zeta \chi &= -\frac{a\varphi_k}{2M_t(v^2 - c^2)} \left\{ \delta \left[1 - \tanh\left(\frac{\zeta}{d}\right) \right] - \frac{a\beta}{d} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\zeta}{d}\right) - \left(a\gamma + \frac{\delta h}{v^2 - c^2} \right) \frac{\operatorname{sech}^2(\zeta/d) \tanh(\zeta/d)}{2d^2} \right\}, \end{aligned}$$

где $\zeta = x - vt$, d — постоянная. Этот солитон переводит систему из начального ($\varphi = 0$) в промежуточное состояние ($\varphi = \varphi_k$). Данное состояние является неравновесным,

поскольку в нем центры масс молекул имеют ненулевые скорости. Последующая релаксация кристалла из промежуточного в конечное состояние (с нулевыми скоростями центров масс молекул) происходит достаточно далеко от солитона и не оказывает существенного влияния на его динамику. Начальное и промежуточное состояния соответствуют двум минимумам эффективного потенциала Φ , т.е. определяются условием

$$\partial_{\varphi} \Phi(\varphi_k, v_k) = 0. \quad (43)$$

При определенной скорости солитона v_k эти минимумы равны:

$$\Phi(0, v_k) = \Phi(\varphi_k, v_k). \quad (44)$$

Топологический солитон в данной системе может двигаться только с одной определенной скоростью, задаваемой уравнениями (43), (44).

Эта модель и ее модификации используются для описания распространения детонационных волн в твердотельных взрывчатых веществах, топахимических реакций (в частности, горения) в молекулярных кристаллах, переноса протонов по цепочкам водородных связей, структурных переходов в полимерах [56]. Топологический солитон во всех этих случаях осуществляет "перенос состояния", т.е. переводит систему из начального состояния в промежуточное. Затем система релаксирует из промежуточного состояния в конечное. Среди топахимических реакций, протекающих по солитонному механизму, отметим твердофазную полимеризацию диацетиленов [56]. В результате реакции молекулярный монокристалл мономера переходит в монокристалл полимера без участия жидкого переходного состояния. В этом случае перемещение топологического солитона на величину, равную параметру решетки, соответствует элементарному акту роста полимерной цепи (т.е. смещению одной молекулы мономера и ее присоединению к цепи). Остаток солитона означает обрыв цепи и образование дефекта в полимерном кристалле.

Выше мы рассматривали движение сверхзвукового динамического солитона (23) в зигзагообразной полимерной макромолекуле. Вопрос о том, как изменятся свойства этого солитона, если молекула находится в полимерном кристалле, был исследован в работах Балабаева и др. [34, 35]. Здесь впервые эффекты, связанные с приобретением динамическим солитоном топологического заряда за счет слабой межцепной связи, были исследованы не только в приближении "ангармоническая цепь на подложке," как в работах Косевича и Ковалева [50] и Савина [49], но и при учете подвижности всех молекулярных цепей в кристалле. Рассматривался кристалл полиэтилена, состоящий из параллельных полимерных цепей в конформации плоского транс-зигзага. Аналитически и численно авторы работы [35] нашли решение уравнений, описывающих динамику этого кристалла в приближении неподвижных соседних цепей. Оно представляет собой сверхзвуковой топологический солитон растяжения, движущийся со скоростью $v = 1,49 \times 10^4$ м с⁻¹ = 1,012c, где c — скорость звука в цепи. В работах [34, 35] также изложены результаты молекулярно-динамического моделирования поведения солитонов растяжения (вакансий) в трехмерном полимерном кристалле, когда все цепи подвижны. Наблюда-

лось движение солитона растяжения со сверхзвуковой скоростью $v = 1,5 \times 10^4$ м с⁻¹ = 1,019c. При "выключении" взаимодействия между цепью, несущей солитон, и соседними цепями сверхзвуковой топологический солитон распался на четыре динамических солитона, движущихся с близкими скоростями. "Выключение" взаимодействия означает, что кристаллическое окружение цепи, несущей солитон, было устранено. Другими словами, эта цепь была мгновенно изъята из кристалла таким образом, что относительные скорости и смещения всех атомов в момент изъятия не изменились. Разумеется, такую операцию можно провести только в численном эксперименте. Закон сохранения топологического заряда при этом, конечно, нарушается, поскольку именно кристаллическое окружение фиксирует величину заряда. Наблюдавшийся распад солитона доказывает, что сверхзвуковые топологические солитоны в полиэтилене являются связанными состояниями нескольких динамических солитонов. Напомним, что аналогичное поведение сверхзвуковых солитонов в одномерной системе ранее было обнаружено в работе Савина [49]. Балабаев и др. [34, 35] впервые наблюдали это явление в трехмерном кристалле.

Подводя итог обсуждения свойств сверхзвуковых солитонов, отметим их принципиальное отличие от недавно открытых сверхсветовых электромагнитных солитонов [61, 62]. Эти сверхсветовые солитоны могут распространяться только в неравновесных средах, они не переносят информацию. В отличие от них рассмотренные нами сверхзвуковые топологические солитоны распространяются в равновесных системах и переносят информацию.

3. Релятивистские и квазирелятивистские эффекты в динамике дислокаций

Перейдем теперь к многомерным механическим системам. В этом разделе и в разделе 4 мы ограничим наше рассмотрение механикой сплошных сред, подчиняющихся соотношениям линейной теории упругости. Хотя до этого наше внимание было сосредоточено на различных нелинейных моделях, в данном случае такое ограничение вполне оправдано. Наличие топологического заряда — геометрическое свойство, поэтому нелинейность динамических уравнений, вообще говоря, не является обязательной. Топологические солитоны, в частности, дислокации, могут существовать и в линейных системах. Разумеется, реальные кристаллы всегда нелинейны, но нелинейные свойства кристаллической решетки наиболее заметно проявляются вблизи центра дислокации, в области ее ядра, и они не оказывают заметного влияния на ряд дислокационных эффектов. Именно поэтому уравнения линейной теории упругости широко используются при изучении дислокаций [2, 63]. При рассмотрении аналогов релятивистских эффектов в физике дислокаций (разумеется, при не слишком больших скоростях дефектов) мы также вполне можем ограничиться линейной теорией упругости.

3.1. Динамика винтовых дислокаций

Рассмотрим вначале прямолинейную винтовую дислокацию в трехмерном кристалле, параллельную оси z и движущуюся со скоростью v в направлении оси x

(см. рис. 1). Перейдем к континуальному приближению и будем считать сплошную среду изотропной. Тогда смещения частиц среды u_3 вокруг дислокации являются решениями уравнения

$$\mu(\partial_1^2 + \partial_2^2)u_3 = \rho\partial_t^2 u_3 \quad (45)$$

при дополнительном граничном условии: решение уравнения (45) удовлетворяет определению вектора Бюргерса (1), которое в данном случае принимает вид

$$b = \oint_L du_3.$$

Здесь и далее индекс i у переменной u_i обозначает направление смещения: 1 — смещение в направлении оси x , 2 — в направлении оси y , 3 — в направлении оси z ; μ — модуль сдвига, ρ — плотность континуума, $\partial_1 \equiv \partial/\partial x$. Уравнение (45) инвариантно относительно преобразований Лоренца с параметром $c_t = (\mu/\rho)^{1/2}$ (т.е. преобразований, в которых скорость поперечных звуковых волн c_t занимает место скорости света). Его решение, соответствующее движущейся винтовой дислокации, имеет вид [2]

$$u_3 = \frac{b}{2\pi} \arctan \frac{\gamma y}{x - vt}, \quad (46)$$

где $\gamma = (1 - v^2/c_t^2)^{1/2}$. Начало отсчета координат выбрано на дислокации. Смещения u_1 и u_2 в данном случае равны нулю.

Механические напряжения вокруг дислокации имеют вид

$$\sigma_{13} = \mu\partial_1 u_3 = -\frac{\mu b \gamma y}{2\pi[(x - vt)^2 + \gamma^2 y^2]},$$

$$\sigma_{23} = \mu\partial_2 u_3 = \frac{\mu b \gamma (x - vt)}{2\pi[(x - vt)^2 + \gamma^2 y^2]}. \quad (47)$$

Перейдем к цилиндрическим координатам. Тогда единственная отличная от нуля компонента тензора механических напряжений описывается формулой

$$\sigma_{\varphi z}(r, \varphi) = \frac{\mu b \gamma}{2\pi r (\cos^2 \varphi + \gamma^2 \sin^2 \varphi)}, \quad (48)$$

где $r^2 = (x - vt)^2 + y^2$, угол φ отсчитывается от оси x . На рисунке 9 показаны сечения поверхности, задаваемой условием $\sigma_{\varphi z} = \text{const}$, плоскостью $z = \text{const}$ для случаев $v = 0$ и $0 < v < c_t$. Такую же зависимость от координат и скорости имеет напряженность электрического поля бесконечного прямолинейного заряженного стержня, параллельного оси z и движущегося со скоростью v в направлении оси x :

$$\mathbf{E}(r, \varphi) = \frac{2q\mathbf{r}\gamma}{r^2(\cos^2 \varphi + \gamma^2 \sin^2 \varphi)}, \quad (49)$$

где q — линейная плотность заряда стержня, $\mathbf{r} = (x - vt, y)$ — радиус-вектор от стержня к точке наблюдения поля. В формуле (49) $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{1/2}$, где c — скорость света. Происхождение аналогии между соотношениями (48) и (49) мы разъясним в разделе 4, где будут обсуждаться параллели между динамической

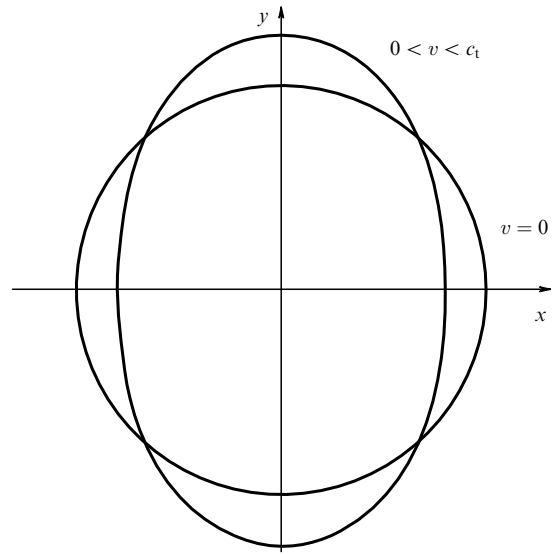


Рис. 9. Сечения поверхности, задаваемой условием $\sigma_{\varphi z} = \text{const}$, плоскостью $z = \text{const}$ для неподвижной винтовой дислокации и дислокации, движущейся со скоростью $0 < v < c_t$.

теорией топологических дефектов и фундаментальными теориями поля — электродинамикой и теорией гравитации.

Кинетическая энергия дислокации представляет собой кинетическую энергию упругого континуума в окрестности дефекта:

$$T = \frac{1}{2} \int \rho \partial_t u_i \partial_t u_i dV. \quad (50)$$

Подставляя в формулу (50) поле смещений винтовой дислокации (46), получаем [63, 64]:

$$T = \frac{\rho}{2} \int (\partial_t u_3)^2 dV = \frac{E_0 v^2}{2c_t^2 \gamma},$$

где энергия покоя винтовой дислокации

$$E_0 = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0},$$

R и r_0 — пределы интегрирования по r в цилиндрических координатах. Обычно R принимают равным расстоянию от дислокации до границы кристалла, а r_0 — равным параметру решетки. Потенциальная энергия дефекта U представляет собой энергию его упругого поля. В континуальном приближении она равна

$$U = \frac{1}{2} c_{idfh} \int \partial_d u_i \partial_h u_f dV, \quad (51)$$

где c_{idfh} — тензор упругих модулей. Подставляя в формулу (51) поле смещений (46), получаем

$$U = \frac{E_0}{\gamma} \left(1 - \frac{v^2}{2c_t^2}\right).$$

Полная энергия винтовой дислокации

$$E = T + U = \frac{E_0}{(1 - v^2/c_t^2)^{1/2}}.$$

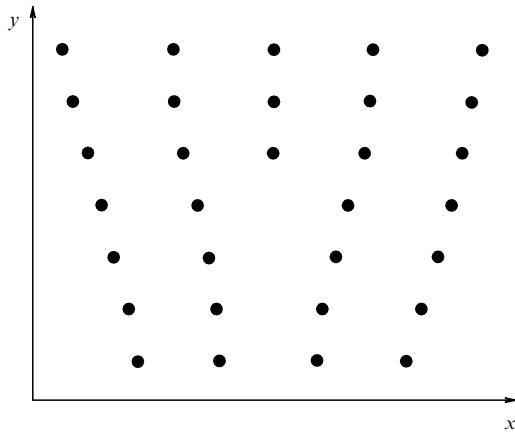


Рис. 10. Краевая дислокация в двумерном кристалле.

Таким образом, энергия винтовой дислокации зависит от скорости по лоренцевскому закону.

3.2. Динамика краевых дислокаций

Рассмотрим краевую дислокацию в двумерном кристалле, схематически представленную на рис. 10. Рассмотренная выше модель Френкеля–Конторовой приближенно описывает поведение атомов в плоскости скольжения краевой дислокации (т.е. в плоскости, проходящей через дислокацию параллельно вектору Бюргерса). Перейдем к континуальному приближению, считая сплошную среду изотропной и подчиняющейся соотношениям линейной теории упругости. Тогда смещения частиц среды вокруг краевой дислокации с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = (b, 0)$, движущейся со скоростью $\mathbf{v} = (v, 0)$, являются решениями системы уравнений [2]

$$\mu \partial_j \partial_j u_i + (\mu + \lambda) \partial_i \partial_j u_j = \rho \partial_t^2 u_i \quad (52)$$

при дополнительном граничном условии: решение уравнения (52) удовлетворяет определению вектора Бюргерса (1). Здесь λ — постоянная Ламэ. В двумерном кристалле существуют продольные и поперечные звуковые волны. Их скорости всегда различны. Поэтому вполне естественно, что формулы, описывающие движение краевой дислокации (в частности, уравнение (52)), не являются лоренц-инвариантными. Решение уравнения (52), соответствующее движущейся краевой дислокации, имеет вид [64]

$$\begin{aligned} u_1(x, y, t) &= \frac{bc_t^2}{\pi v^2} \left[\arctan \frac{y(1 - v^2/c_t^2)^{1/2}}{x - vt} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{v^2}{2c_t^2} - 1 \right) \arctan \frac{y(1 - v^2/c_t^2)^{1/2}}{x - vt} \right], \\ u_2(x, y, t) &= \frac{bc_t^2}{2\pi v^2} \left\{ \frac{v^2/(2c_t^2) - 1}{(1 - v^2/c_t^2)^{1/2}} \times \right. \\ &\quad \times \ln \left[(x - vt)^2 + \left(1 - \frac{v^2}{c_t^2} \right) y^2 \right] + \\ &\quad \left. + \left(1 - \frac{v^2}{c_t^2} \right)^{1/2} \ln \left[(x - vt)^2 + \left(1 - \frac{v^2}{c_t^2} \right) y^2 \right] \right\}, \quad (53) \end{aligned}$$

где $c_t = [(\lambda + 2\mu)/\rho]^{1/2}$ — скорость продольных звуковых волн. Начало отсчета координат выбрано на дислокации. Соотношение эквивалентности массы и энергии также изменяется. Для краевой дислокации оно выглядит так [2, 64]:

$$E_0 = \frac{Mc_t^2}{1 + c_t^4/c_l^4}, \quad (54)$$

где M — масса дислокации.

Смещения (53) можно разделить на две аддитивные компоненты u_t и u_l , трансформирующиеся по преобразованиям Лоренца с различными параметрами (скоростями звука c_t и c_l) [2]. Но для дислокационной энергии и импульса такое разделение невозможно. Действительно, из формул (50), (51) следует, что в выражение для дислокационной энергии входят слагаемые, трансформирующиеся по преобразованиям Лоренца с параметром c_t , слагаемые, трансформирующиеся по преобразованиям Лоренца с параметром c_l , а также перекрестные члены, появляющиеся из-за перемножения производных смещений u_t и u_l . Следовательно, если нам известно, например, значение энергии покоя краевой дислокации, то мы не можем найти ее энергию при некоторой скорости v непосредственным применением преобразований Лоренца или каких-либо более сложных локальных преобразований. Необходимо сначала вычислить смещения частиц среды, созданные данной дислокацией, разделить их на компоненты u_t и u_l , применить к этим компонентам преобразования Лоренца двух различных типов, затем вычислить энергию дислокации, движущейся со скоростью v . Таким образом, в теории солитонов в двумерном пространстве, в отличие от рассмотренного выше одномерного случая, преобразования Лоренца утрачивают свою роль универсального инструмента для вычисления дислокационных характеристик при различных скоростях. Уравнения динамической теории дислокаций (см. раздел 4) также не удовлетворяют условию лоренц-инвариантности.

В работе Фушича и Наконечного [65] показано, что волновое уравнение, описывающее распространение упругих волн в изотропной сплошной среде, инвариантно относительно нелокальной конформной группы $S(3,1)$, содержащей интегро-дифференциальные преобразования. Эта группа играет в теории упругости изотропного континуума ту же роль, что группа Лоренца в электродинамике. Однако при описании движения дислокаций в анизотропной среде, где в любом направлении могут, вообще говоря, распространяться звуковые волны с тремя различными скоростями, ситуация становится значительно сложнее. Для этого случая аналог группы Лоренца до сих пор не найден. Тем не менее в рамках теории дислокаций можно получить аналоги различных формул специальной теории относительности. Таким образом, теорию дислокаций вполне можно называть квазирелятивистской. Но лоренц-инвариантными ее соотношения (в этом можно убедиться на примере формул (53), (54)) становятся только в предельном случае, когда скорость продольных звуковых волн c_l стремится к бесконечности. Только в случае прямолинейной винтовой дислокации в трехмерном изотропном континууме все формулы являются лоренц-инвариантными независимо от значения c_l .

3.3. О происхождении релятивистских и квазирелятивистских эффектов в теории дислокаций

Все результаты раздела 3.2 остаются в силе и для прямолинейной краевой дислокации в трехмерном кристалле. Вектор Бюргерса прямолинейной винтовой дислокации параллелен дислокационной линии, а вектор Бюргерса краевой дислокации этой линии перпендикулярен. В самом общем случае, наиболее часто встречающемся в реальных кристаллах, этот вектор образует с дислокацией угол, не равный ни 0, ни $\pi/2$, причем этот угол принимает различные значения в разных точках дислокационной линии (поскольку направление вектора Бюргерса всегда остается неизменным, а направление дислокации может изменяться произвольным образом). Таким образом, одна и та же дислокация может быть краевой на одном участке линии и винтовой на другом. Мы показали, что динамическая теория винтовых дислокаций удовлетворяет условию лоренц-инвариантности, а теория краевых дислокаций — нет. Следовательно, должен существовать непрерывный переход от лоренц-инвариантных соотношений к формулам, не удовлетворяющим условию лоренц-инвариантности. Все эти результаты можно получить, используя одни и те же общие соотношения теории дислокаций.

Важно иметь в виду, что все приведенные выше релятивистские и квазирелятивистские соотношения найдены в рамках классической механики упругого континуума. Поэтому их можно получить вполне классическими методами, которыми обычно не пользуются в релятивистской физике. Так, выражения (46), (53) можно найти, используя формулы Мура [66] для дисторсий, созданных дислокациями. Эти довольно сложные соотношения приобретают более простой вид в четырехмерных обозначениях [4]:

$$\beta_{jn}(x_f) \equiv \partial_n u_j(x_f) = c_t^{-2} C^{iabd} e_{nhag} \int_{\Omega} J^h_{i^g}(x'_f) \times \\ \times \hat{\partial}_d G_{bj}(x_f - x'_f) d\Omega', \quad (55)$$

где $b, i, j = 1, 2, 3$; $a, d, f, g, h, n = 0, 1, 2, 3$; $c_t = (c^{1212}/\rho)^{1/2}$, $\hat{\partial}_0 \equiv c_t^{-1} \partial_t$,

$$C^{iabd} = \begin{cases} c^{iabd} & \text{при } a = 1, 2, 3, \\ -\delta^{bi} \delta^{ad} \rho c_t^2 & \text{при } a = 0. \end{cases}$$

c^{iabd} — трехмерный тензор модулей упругости, δ^{bi} — символ Кронекера, e_{nhag} — четырехмерный полностью антисимметричный тензор Леви – Чивиты, $e^{0123} = 1$,

$$J^h_{i^g}(x'_f) = \tau^h b_i V^g \delta(x'_f - x_f^0) \quad (56)$$

— тензор плотности потока дислокаций, τ^h — единичный вектор, касательный к линии дислокации, $V^g = (c_t, -\mathbf{V})$ — четырехмерная скорость дислокации, \mathbf{V} — трехмерный вектор скорости дислокации, $\delta(x'_f - x_f^0)$ — дельта-функция Дирака, x_f^0 — координаты дислокационной линии, $d\Omega' = dV' d(c_t t')$ — элемент объема в четырехмерном пространстве-времени, G_{bj} — тензорная функция Грина уравнений классической линейной теории упругости рассматриваемого континуума. Обращает на себя внимание тот факт, что приведенное выше выражение для четырехмерной скорости дислокации отличается от привычной формулы специальной теории относительности. Это объясняется тем, что формулы

динамической теории дислокаций, вообще говоря, не являются лоренц-инвариантными.

Анализ рассмотренных выше примеров релятивистских и квазирелятивистских эффектов приводит к выводу: все эти эффекты являются следствием запаздывания сигналов при движении солитонов. Роль сигналов в этих случаях выполняют не электромагнитные, как в специальной теории относительности, а продольные и поперечные звуковые волны. Действительно, сокращение ширины движущегося кинка по лоренцевскому закону, рассмотренное в разделе 2.1, объясняется тем, что атомы цепочки, находящиеся впереди кинка, не успевают сместиться в положения, соответствующие максимальной ширине кинка. За то время, в течение которого они смещаются, кинк приближается, поэтому та же самая разность смещений u наблюдается в более узкой области L . Таким же запаздыванием объясняется изменение формы упругого поля движущейся дислокации, показанное на рис. 9.

Влияние запаздывания сигналов на форму поля смещений описывается формулой Мура (55), выражающей дислокационные дисторсии через динамическую функцию Грина. Напомним определение этой функции в континуальной теории упругости. Динамическая функция Грина определяется как решение классических уравнений движения упругого континуума [67]:

$$c_{ijnl} \partial_l \partial_j G_{nr}(\mathbf{x}, t) + \delta_{ir} \delta(\mathbf{x}) \delta(t) = \rho \partial_t^2 G_{ir}(\mathbf{x}, t).$$

Функция Грина $G_{ij}(\mathbf{x}, t)$, как известно, представляет собой компоненту упругого смещения в направлении x_i в точке \mathbf{x} в момент времени t , вызванного единичной импульсной силой, приложенной в направлении x_j в точке $\mathbf{x} = 0$ в момент времени $t = 0$. Именно динамическая функция Грина описывает запаздывание сигналов при различных воздействиях на систему. Движение дислокации является одним из таких воздействий. Все рассмотренные выше релятивистские и квазирелятивистские эффекты, появляющиеся в теории солитонов, определяются в конечном счете свойствами функции Грина и являются следствиями формулы Мура (55). Эта формула представляет собой наиболее общее соотношение динамической теории дислокаций: из нее следуют как лоренц-инвариантные релятивистские формулы (раздел 3.1), так и квазирелятивистские соотношения, не удовлетворяющие условию лоренц-инвариантности (раздел 3.2). Формула Мура (55) получена в рамках классической механики упругого континуума, поэтому все рассмотренные выше релятивистские и квазирелятивистские формулы теории солитонов являются следствием постулатов Ньютона.

Из проведенного рассмотрения следует, что только величины, выражающиеся через дислокационные дисторсии, зависят от скорости дислокации по лоренцевскому закону. Другими словами, релятивистским и квазирелятивистским образом зависят от скорости только физические величины, связанные с запаздыванием сигналов при движении солитона: поля упругих деформаций и механических напряжений, источником которых является дислокация, энергия солитона, импульс, сила, действующая на дислокацию со стороны упругого поля, и т.д. Те величины, которые не выражаются через функцию Грина, т.е. не связаны с запаздыванием сигналов (скорость дислокации, параметры решетки), не зависят от скорости солитона релятивист-

ским образом. Это, впрочем, не препятствует использованию четырехмерных обозначений для этих величин [4].

3.4. Трансзвуковые и сверхзвуковые дислокации

В разделе 2 мы рассмотрели различные примеры сверхзвуковых топологических солитонов в одномерных системах. Поэтому вполне естественно ожидать, что топологические солитоны в двумерных и трехмерных системах (в частности, дислокации в кристаллах) также должны обладать способностью двигаться быстрее звука. К сожалению, проблема сверхзвукового движения дислокаций изучена значительно хуже, чем проблема сверхзвуковых солитонов в одномерных системах. Хотя первые работы на эту тему появились еще в 40-е годы XX века, сегодня они не представляют особого интереса, так как их авторы пытались решить данную проблему в рамках линейной теории упругости. Из рассмотренных выше примеров сверхзвуковых солитонов следует, что для решения проблемы сверхзвуковых дислокаций необходим учет нелинейных и дисперсионных членов в уравнениях теории упругости.

Поскольку в двумерных и трехмерных кристаллах распространяются как поперечные, так и продольные звуковые волны, введем несколько новых терминов. Дозвуковой скоростью будем называть скорость дислокации v , которая меньше скорости поперечных звуковых волн c_t . Скорость трансзвуковой дислокации v удовлетворяет неравенству $c_t < v < c_l$, где c_l — скорость продольных звуковых волн. Сверхзвуковой будем называть дислокацию, которая движется быстрее продольных звуковых волн.

Первой работой по проблеме трансзвуковых дислокаций, учитывающей ангармонизм кристаллической решетки, была статья Гувера и др. [68]. Они численно моделировали движение краевых дислокаций в плотноупакованной гексагональной решетке. Атомы решетки взаимодействовали по центральному закону. Гувер и др. наблюдали движение дислокации с трансзвуковой скоростью $v = 0,89c_l$. Однако никаких подробностей об этом режиме движения дислокации авторы не сообщили. Позже Гумбш и Гао [69] более тщательно исследовали эту проблему. Они численно моделировали движение краевых дислокаций в объемноцентрированной кубической решетке вольфрама методом молекулярной динамики. К образцу прикладывали внешнее сдвиговое напряжение. При небольшой нагрузке дислокации двигались с дозвуковыми скоростями ($0,65c_l - 0,7c_l$). При увеличении внешнего сдвигового напряжения они начинали двигаться с трансзвуковыми скоростями. Затем дислокация двигалась медленнее, останавливалась и оставалась в одной точке в течение 0,5 пс. Во время этой остановки широкое ядро трансзвуковой дислокации сжималось до размеров ядра дозвукового дефекта, после чего дислокация двигалась со скоростью $\sim 0,7c_l$. Преодоление звукового барьера дозвуковыми дислокациями не наблюдалось: дислокации рождались с трансзвуковыми скоростями. Выше мы уже отмечали, что этим свойством обладают солитоны в одномерных системах, — они также могут рождаться со сверхзвуковыми скоростями.

При постепенном увеличении нагрузки наблюдалось увеличение скорости трансзвуковой дислокации от $1,38c_l$ до $1,5c_l$. Поскольку дислокация является источником упругого поля, при ее движении быстрее скорости

самого поля (т.е. быстрее скорости звука) должно наблюдаться излучение звуковых волн (это явление представляет собой акустический аналог известного эффекта Вавилова – Черенкова). Гумбш и Гао [69] наблюдали это излучение, но только в той части упругого поля дислокации, где кристалл был растянут. В области поля сжатия излучение не наблюдалось.

При еще больших внешних нагрузках дислокация двигалась быстрее продольных звуковых волн. Конфигурация дислокационного ядра при этом мало отличалась от конфигурации ядра трансзвуковой дислокации, но анизотропия дислокационного излучения была еще сильнее. В области поля растяжения наблюдался один волновой фронт продольных колебаний, тогда как в области поля сжатия — от четырех до пяти локализованных фронтов. Линейная теория упругости предсказывает в этом случае появление двух симметричных пар волновых фронтов (одна пара соответствует излучению поперечных звуковых волн, другая — продольных). Можно предположить, что дополнительные фронты соответствуют нелинейным модам звукового спектра.

Позже результаты Гумбша и Гао были подтверждены работами других исследователей. Ши и др. [70] также провели ряд численных экспериментов с решеткой вольфрама и наблюдали трансзвуковое движение краевых дислокаций в этом кристалле. Коизуми и др. [71] обнаружили трансзвуковое движение винтовых дислокаций в численных экспериментах. Они моделировали трехмерную кубическую решетку. Атомные ряды, параллельные оси z , двигались в этой решетке как абсолютно жесткие стержни. Когда скорость дислокации превышала $0,7c_l$, в поле механических напряжений дислокации рождались пары дислокаций с векторами Бюргера противоположного знака (это процесс, обратный аннигиляции топологического солитона и антисолитона).

Росакис [72] предложил модификацию модели Пайерлса, описывающую трансзвуковые и сверхзвуковые дислокации. Напомним, что в модели Пайерлса [2] кристалл, содержащий дислокацию, рассматривается как линейный упругий континуум всюду за исключением плоскости скольжения дислокации, где учитывается дискретность реального кристалла и нелинейность его упругих свойств, характеризуемая потенциалом $\Phi(u)$, где u — смещение атомов. Росакис показал, что добавление к производной потенциала $\Phi'(u)$ слагаемого, описывающего градиентную нелинейность вида $c(\partial_x u)^2$, где ось x — направление движения дислокации, делает трансзвуковое и сверхзвуковое движение краевых дислокаций возможным. Было бы интересно исследовать связь этого результата с описанными выше результатами о сверхзвуковом движении топологических солитонов в одномерных моделях с градиентной нелинейностью.

4. Калибровочная теория линейных дефектов и фундаментальные теории поля

Выше в разделе 3.1 мы уже отмечали эквивалентность (с точностью до замены констант) между формулой, описывающей зависимость поля механических напряжений прямолинейной винтовой дислокации от ее скорости и координат, и формулой, описывающей зависимость напряженности электрического поля бесконечного прямолинейного заряженного стержня от его координат и скорости. Очевидно, что это совпадение не случайно. Оно

является частью аналогии между динамической теорией дислокаций и электродинамикой [3, 4]. Понимание этой аналогии необходимо для выяснения связи между релятивистскими эффектами в электродинамике и классической механике.

4.1. Калибровочная теория линейных дефектов и электродинамика

Действительно, дислокации являются источниками упругого поля (поля механических напряжений и деформаций), а электрические заряды — источниками электромагнитного поля. Но источниками упругого поля являются любые дефекты в кристаллах, например трещины. Отличительной особенностью линейных дефектов (дислокаций и дисклинаций) является их топологическая природа. Именно она обуславливает калибровочный характер динамической теории этих дефектов. Топологические заряды дефектов (векторы Бюргера в случае дислокаций) аналогичны электрическим зарядам. Эти заряды являются сохраняющимися величинами. Калибровочные преобразования в теории дефектов представляют собой аналог известных градиентных преобразований потенциала в электродинамике. Рассмотрим в качестве примера прямолинейную винтовую дислокацию, параллельную оси z (см. рис. 1). Введем цилиндрическую систему координат, начало отсчета выберем на дислокации. В континуальном приближении (считаем континуум изотропным) поле смещений частиц среды вокруг неподвижной дислокации имеет вид $u_z = b\phi/2\pi$. Угол ϕ можно отсчитывать от любой оси, перпендикулярной дислокации. Переход от одной из таких осей к другой (т.е. переход к другой системе координат) приводит к тому, что к смещениям u_z прибавляется некоторая постоянная. Дисторсии $\beta_{jn} = \partial_n u_j$ и механические напряжения

$$\sigma_{bh} = C_{bhjn} \beta^{jn} \quad (57)$$

при этом не изменяются. Снова проведем аналогию с электродинамикой: при калибровочных преобразованиях потенциала A_j тензор электромагнитного поля $F_{jn} = \partial_j A_n - \partial_n A_j$ (его компонентами являются компоненты векторов напряженности электрического \mathbf{E} и магнитного \mathbf{H} полей) не изменяется.

В том, что именно тензоры дисторсий β_{jn} и механических напряжений σ_{jn} являются аналогами тензоров электромагнитного поля F_{jn} и H_{jn} , можно убедиться, сравнив выражение для плотности энергии электромагнитного поля

$$W_{em} = \frac{1}{16\pi} (-4F^{0i}H^0_i + F_{in}H^{in}) = \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}\mathbf{D} + \mathbf{H}\mathbf{B}),$$

где $i, n = 1, 2, 3$, \mathbf{D} — индукция электрического поля, \mathbf{B} — индукция магнитного поля, и формулу для плотности энергии упругого поля (в трехмерных обозначениях)

$$W_{el} = \frac{1}{2} [\rho(\partial_i u_i)^2 + \beta_{in}\sigma_{in}].$$

Используя введенные выше четырехмерные обозначения, можно записать плотность энергии упругого поля в виде

$$W_{el} = \frac{1}{2} (-\beta^{i0}\sigma_i^0 + \beta^{in}\sigma_{in}),$$

где $i, n = 1, 2, 3$.

Следует отметить важное различие между калибровочной теорией дефектов и электродинамикой. В электродинамике и во всех калибровочных теориях типа Янга–Миллса тензор калибровочного поля F_{jn}^a (в электродинамике $a = 1$) является антисимметричным относительно перестановки индексов j и n . В теории дефектов аналогичные тензоры β_{jn} и σ_{jn} , вообще говоря, не являются ни симметричными, ни антисимметричными. В рамках линейной теории упругости в большинстве случаев можно пренебречь антисимметричной частью тензора дисторсий, описывающей малые повороты континуума, и антисимметричной частью тензора механических напряжений (моментными напряжениями). Тогда вместо тензора дисторсий следует использовать симметричный тензор деформаций $\varepsilon_{jn} = (\partial_n u_j + \partial_j u_n)/2$. В этом случае аналогия с тензором электромагнитного поля F_{jn} становится еще более очевидной.

Различие симметрии и тензорной размерности величин, описывающих калибровочные поля, приводит к выводу, что в калибровочной теории дислокаций нельзя напрямую использовать соотношения электродинамики или калибровочных теорий типа Янга–Миллса. Так, лагранжиан взаимодействия дислокаций с упругими полями не может иметь форму свертки вектора смещений частиц среды u_i и тензора плотности потока дислокаций $J^{i,s}$, поскольку это тензор третьего ранга. Далее в этом разделе будет кратко изложен метод построения лагранжиана взаимодействия линейных дефектов (дислокаций и дисклинаций) и упругих полей, предложенный в работе Мусяенко и Копчика [4]. Однако, поскольку такие дефекты, как дисклинации, известны сравнительно мало, вначале дадим несколько определений.

Рассмотренные выше дислокации представляют собой локальные нарушения трансляционной симметрии кристалла. В отличие от них дисклинации являются локальными нарушениями ориентационной симметрии кристалла (т.е. симметрии относительно группы поворотов). Дисклинации обладают топологическими зарядами — векторами (строго говоря, псевдовекторами) Франка. В континуальном приближении вектор Франка представляет собой интеграл [73, 74]

$$\omega_i = \frac{1}{2} \oint_L e_{imn} \partial_s \partial_m u_n dx_s,$$

где L — любой замкнутый контур, охватывающий дисклинацию.

Используя четырехмерные обозначения, введенные в разделе 3.3, представим лагранжиан упругих полей в анизотропном континууме в виде

$$L_0 = -\frac{1}{2} C^{irjn} \partial_r u_i \partial_n u_j. \quad (58)$$

Здесь $n, r = 0, 1, 2, 3$; $i, j = 1, 2, 3$. В разделе 3.3 мы привели формулу Мура, выражающую дислокационные дисторсии через плотность дислокаций. Аналогичные выражения для дисклинаций были найдены в работе Коссеки и де Вита [75]. В четырехмерных обозначениях их результаты принимают вид

$$\begin{aligned} \partial_r u_n(x_a) = & -\frac{1}{c_i^2} \int_{\Omega} e_{ighf} C^{jilh} \partial_i G_{jn}(x_a - x'_a) I'_{lr^s}(x'_a) \times \\ & \times (x'^r - \tilde{x}^r) d\Omega' - \frac{1}{2} \int_{\Sigma} C^{jilh} \partial_i G_{jn}(x_a - x'_a) e_{ghbq} \Omega_{lf} \times \\ & \times V^g df'^{bq} \delta(x'_a - x_a^0), \end{aligned} \quad (59)$$

где $a, f, g, h, i, t = 0, 1, 2, 3$; $b, j, l, n, q, r = 1, 2, 3$; тензор плотности потока дисклинаций

$$I_{lr}^t(x_i) = \tau^t \Omega_{lr} V^g \delta(x_i - x_i^0), \quad (60)$$

$\Omega_{nj} = e_{nij} \omega^i$ (при $n = 0$ или $j = 0$ компоненты тензора Ω_{nj} считаются равными нулю), x_i^0 — координаты дисклинационной линии, \tilde{x}^r — координаты точки приложения вектора Франка к дисклинационной линии, V^g — скорость дисклинации, df^{tbc} — элемент площади, лежащий в плоскости, образованной ортами e^b и e^c , Σ — поверхность образования дисклинации, т.е. произвольная поверхность, границей которой является дисклинация.

Заменяем дисторсии в лагранжиане (58) на суммы дисторсий, созданных внешним упругим полем, и дисторсий (55) и (59), порожденных дефектами. Преобразовав получившееся выражение, найдем лагранжиан взаимодействия упругих полей с дефектами:

$$L_{\text{int}} = -\frac{1}{c_t} B_{gij} K^{gij},$$

где четырехмерный тензор тока дефектов

$$K^{gij}(x_d) = e^{gajb} [J_a^i b(x_d) + I_a^{ir} b(x_d)(\tilde{x}_r - x_r)] + \frac{1}{2} \int_{\Sigma} \Omega^{gi} V_j e^{jqt} \delta(x_d - x'_d) df^t_{qt},$$

$a, i, q, r, t = 1, 2, 3$; $b, d, f, g, j = 0, 1, 2, 3$; B_{gij} — тензорный потенциал, аналог векторного потенциала A_j в электродинамике. Четырехмерный тензор механических напряжений связан с тензорным потенциалом соотношением

$$\sigma_{ij} = \partial^d B_{dij}.$$

Полный лагранжиан среды с дефектами

$$L = L_0 + L_{\text{int}} + L_m. \quad (61)$$

Здесь L_m — материальный лагранжиан, характеризующий энергию дефектов без учета их упругого взаимодействия. В электродинамике его аналогом является дираковский лагранжиан электрон-позитронного поля. Точный вид лагранжиана L_m для дислокаций и дисклинаций пока не найден. Именно поэтому до сих пор не удается получить лагранжиан взаимодействия дефектов и упругих полей каноническим калибровочным способом — заменой частных производных в материальном лагранжиане на ковариантные. Некоторые авторы (например, Кадич и Эделен [5]) использовали этот способ, но они опирались на совершенно другую аналогию между калибровочной теорией линейных дефектов и теориями поля (в частности, электродинамикой). В подходе Кадич и Эделена плотность потока дислокаций оказывается аналогом напряженности и индукции электрического и магнитного полей. Материальным лагранжианом в этой теории является лагранжиан упругого поля в бездефектном континууме. Взаимодействие дефектов с упругими полями Кадич и Эделен описывали, заменяя частные производные в лагранжиане упругого поля на ковариантные. Мы считаем этот подход некорректным. Из проведенного выше рассмотрения очевидно, что дефекты, обладающие топологическими зарядами, следует рассматривать как аналоги заряженных частиц, а не безмас-

совых квантов-переносчиков взаимодействий, как это делают Кадич и Эделен [5]. Аналогом электромагнитного поля в нашем подходе, как и в работе Косевича [3], является упругое поле.

Отметим, что именно аналогия, предложенная Косевичем [3], была позже использована при построении теории дислокационного плавления двумерных кристаллов [76]. Такое плавление является топологическим фазовым переходом, известным также как переход Березинского–Костерлица–Таулеса. Теория дислокационного плавления основана на аналогии между газом краевых дислокаций и двумерным кулоновским газом (газом заряженных частиц).

Варьируя потенциалы поля, получаем из (61) уравнения для упругих полей:

$$\partial^h \sigma_{nh} = \frac{1}{c_t} C_{ngij} K^{gij}, \quad (62)$$

где $i, n = 1, 2, 3$; $g, h, j = 0, 1, 2, 3$. Для неподвижных дислокаций эти уравнения (в трехмерных обозначениях) были найдены Косевичем [3]. Уравнения (62) аналогичны второй паре уравнений Максвелла:

$$\partial_h H^{nh} = -\frac{4\pi}{c} j^n. \quad (63)$$

В теории дислокаций существует также аналог первой пары уравнений Максвелла. Поскольку эти уравнения довольно громоздкие, запишем их для континуума, в котором нет дисклинаций:

$$\partial_g \partial_a u_n(x_b) - \partial_a \partial_g u_n(x_b) = e_{giah} J_n^h(x_b). \quad (64)$$

Здесь $n = 1, 2, 3$; $a, b, g, h, i = 0, 1, 2, 3$. Эти уравнения представляют собой определение дислокации и утверждение об отсутствии дисклинаций в данном континууме. Они аналогичны первой паре уравнений Максвелла:

$$e^{ijlb} \partial_j F_{lb} = 0. \quad (65)$$

Как известно, эти уравнения эквивалентны утверждению об отсутствии в природе магнитных зарядов (монополей). Если суммировать уравнения (64) по три, то они приобретают вид, более сходный с (65). Уравнения (62), как и аналогичные им (63), получены варьированием лагранжиана системы. Уравнения (64) и (65) не являются вариационными.

Используя принцип наименьшего действия, находим из лагранжиана (61) силу, действующую на единицу длины линейного дефекта со стороны упругого поля:

$$f_i = \frac{1}{c_t} \int_V K_{idf} \sigma^{df} dV. \quad (66)$$

Для статической дислокации выражение (66) в трехмерных обозначениях принимает вид

$$f_i = e_{igt} \tau_g b_d \sigma_{dt}. \quad (67)$$

Это известная сила Пича–Келера, аналог кулоновской силы в электродинамике. Рассмотрим, например, две параллельные винтовые дислокации в изотропной среде с векторами Бюргерса \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 , параллельные оси z . Подставим в правую часть формулы (67) механические

напряжения (47), созданные одной из дислокаций. Получаем выражение для силы взаимодействия дислокаций в цилиндрических координатах:

$$\mathbf{F} = \frac{\mu(\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{b}_2) \mathbf{r}}{2\pi r^2},$$

где \mathbf{r} — вектор, соединяющий две дислокации. Следовательно, дислокации одного знака ($\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{b}_2 > 0$) отталкиваются, а разного знака ($\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{b}_2 < 0$) притягиваются.

В динамическом случае появляется поправка к силе (67), зависящая от скорости дефекта. В трехмерных обозначениях она имеет вид

$$f_i = \rho v_n b_n e_{ir} \tau_r V_l.$$

Здесь v_n — скорость частиц среды. Это так называемая дислокационная сила Лоренца, найденная Косевичем [3] другим способом.

В работе Менского [77] показано, что калибровочная группа теории является представлением фундаментальной группы пространства изменения параметров порядка. Параметрами порядка в континуальной теории дислокаций и дисклинаций являются смещения частиц среды. Фундаментальной группой в этом случае является группа $SO(3) \triangleright T(3)$, где \triangleright — символ полупрямого произведения групп поворотов $SO(3)$ и трансляций $T(3)$ в трехмерном пространстве. Следовательно, калибровочной группой данной теории в наиболее общем случае является группа $SO(3) \triangleright T(3)$.

В настоящее время распространено мнение (см., например, [15]), что сохранение топологических зарядов не связано с симметриями лагранжиана системы, т. е. не является следствием теоремы Нётер. В работе [4] было показано, что в рамках калибровочной теории дислокаций и дисклинаций законы сохранения топологических зарядов этих дефектов могут быть получены при помощи второй теоремы Нётер. Действительно, рассмотрим калибровочные преобразования потенциала, не изменяющие значения наблюдаемых полей (тензоров механических напряжений и деформаций):

$$B_{\gamma i \beta} \rightarrow B'_{\gamma i \beta} = B_{\gamma i \beta} + e_{\gamma \beta \delta \alpha} \partial^\alpha \varepsilon_i^\delta + \partial^\nu \partial^\alpha \xi_{\gamma i \beta \nu \alpha}. \quad (68)$$

Здесь $i = 1, 2, 3$, греческие индексы принимают значения от 0 до 3, ε_i^δ — произвольная тензорная функция координат и времени, $\xi_{\gamma i \beta \nu \alpha}$ — также произвольная функция координат и времени, но антисимметричная по двум последним индексам и удовлетворяющая следующим условиям:

$$\partial^\nu \partial^\alpha \xi_{\gamma i \beta \nu \alpha} \neq 0,$$

$$\partial^\nu \partial^\alpha \partial^\alpha \xi_{\gamma i \beta \nu \alpha} = 0.$$

Согласно второй теореме Нётер, каждому калибровочному преобразованию соответствует некоторый закон сохранения. Преобразования (68) с параметрами ε_i^δ приводят к законам сохранения

$$\partial_\mu (J_i^\mu{}^\nu - J^\nu{}^\mu{}_i) - I^\mu{}_{i\mu}{}^\nu + I^\nu{}_{i\mu}{}^\mu = 0. \quad (69)$$

Это аналог закона сохранения электрического заряда в электродинамике, который также следует из второй теоремы Нётер. В отсутствие дисклинаций в данном континууме выражение (69) при $\nu = 0$ означает, что

дислокации не могут обрываться внутри кристалла: они должны либо образовывать замкнутые петли, либо выходить на поверхность кристалла; а при $\nu \neq 0$ оно превращается в уравнение непрерывности для плотности потока дислокаций. При наличии дисклинаций выражение (69) при $\nu = 0$ означает, что дислокации могут оканчиваться на дисклинациях; а при $\nu \neq 0$ оно означает, что движение дисклинаций (при определяемых выражением (69) условиях) сопровождается рождением или уничтожением дислокаций.

Преобразования (68) с параметрами $\xi_{\gamma i \beta \nu \alpha}$ приводят к аналогичным дисклинационным законам сохранения:

$$\partial_\mu (I^\delta{}_{i\gamma}{}^\mu - I^\mu{}_{i\gamma}{}^\delta) = 0. \quad (70)$$

Законы сохранения топологических зарядов (69) и (70) ранее были найдены [78] в трехмерном виде как результат топологических закономерностей. Таким образом, вторая теорема Нётер позволяет получить как уравнения непрерывности для дислокационного и дисклинационного потоков, описывающие сохранение топологических зарядов линейных дефектов при их движении, так и статические соотношения, характеризующие пространственную непрерывность самих протяженных дефектов и равенство топологических характеристик в различных точках одного и того же линейного дефекта.

В работе Мусиенко и Копчика [79] изложенная выше калибровочная теория дислокаций и дисклинаций была обобщена на случай кристаллов со сложными решетками, т. е. кристаллов, содержащих больше одного атома в элементарной ячейке.

4.2. Калибровочная теория линейных дефектов и теория гравитации

Многие авторы [80–82] обращали внимание на еще одну аналогию — между динамической теорией линейных дефектов и теорией гравитации. Эта аналогия является более близкой, чем рассмотренная выше аналогия с электродинамикой. Действительно, кристалл, содержащий топологические дефекты, представляет собой многообразие с неевклидовой геометрией. При изучении динамики этого кристалла в континуальном приближении мы можем ввести понятия метрики и связности. Метрический тензор g_{ij} , как известно, определяет величину квадрата интервала:

$$ds^2 = g_{ij} dx^i dx^j.$$

Связность $\Gamma^i{}_{jn}$ характеризует изменение компонент вектора при бесконечно малом параллельном переносе:

$$\delta A^i = -\Gamma^i{}_{jn} A^j dx^n.$$

В случае бездефектного кристалла метрика является евклидовой, а связность — тождественно равной нулю. Если нас интересуют только процессы на масштабах, больших по сравнению с межатомным расстоянием (т. е. в том случае, когда справедливо континуальное приближение), то механические свойства кристалла определяются исключительно его геометрией. Таким образом, ситуация та же, что и в теории гравитации, где взаимодействие частиц определяется геометрическими характеристиками пространства-времени.

Деформация континуума (возможно, включающая образование топологических дефектов) описывается

отображением исходного многообразия $x_i \rightarrow y_i(x)$. Это отображение преобразует исходную евклидову метрику в метрику

$$g_{ij} = \frac{\partial x^n}{\partial y^i} \frac{\partial x^l}{\partial y^j} \delta_{nl} \approx \delta_{ij} - \partial_i u_j - \partial_j u_i = \delta_{ij} - 2\varepsilon_{ij}.$$

Тензор кривизны

$$R_{ijn}{}^l = \partial_i \Gamma_{jn}{}^l - \partial_j \Gamma_{in}{}^l + \Gamma_{ir}{}^l \Gamma_{jn}{}^r - \Gamma_{jr}{}^l \Gamma_{in}{}^r$$

связан с тензором плотности потока дисклинаций (60) соотношением

$$R^{ijnl} = e^{iajb} I_a{}^{nl}{}_b.$$

В теории гравитации, как известно, источником кручения являются частицы и, вообще, любые объекты, обладающие энергией (например, электромагнитное поле).

Тензор кручения

$$T^g{}_{ij} = \Gamma^g{}_{ij} - \Gamma^g{}_{ji}$$

связан с тензором плотности дислокационного потока (56) соотношением

$$T^{gij} = e^{iajb} J_a{}^{g}{}_b. \quad (71)$$

В теории гравитации источником кручения является четырехмерный тензор плотности спина $S^{\lambda}{}_{\mu\nu} = v^{\lambda} S_{\mu\nu}$, где v^{λ} — скорость частицы, обладающей спином, $S_{\mu\nu}$ — антисимметричный тензор. Его пространственные компоненты образуют трехмерный вектор $s = (S^{23}, S^{31}, S^{12})$, равный в системе покоя частицы трехмерной плотности спина. В частности, тензор плотности спина дираковского поля [83]

$$S_{\lambda\mu\nu} = \Psi^+ \gamma_{[\lambda} \gamma_{\mu} \gamma_{\nu]} \Psi,$$

где Ψ — спинор Дирака, Ψ^+ — дираковски сопряженный спинор, γ_{μ} — матрицы Дирака; по индексам в квадратных скобках производится антисимметризация. Связь плотности спина с кручением описывается формулой [83, 84]

$$T^{\lambda}{}_{\mu\nu} = \frac{16\pi G}{c^3} \left(S^{\lambda}{}_{\mu\nu} + \frac{1}{2} \delta_{\mu}^{\lambda} S_{\nu} - \frac{1}{2} \delta_{\nu}^{\lambda} S_{\mu} \right). \quad (72)$$

Здесь G — ньютоновская гравитационная постоянная, c — скорость света, $S_{\mu} = S^{\lambda}{}_{\mu\lambda}$.

5. Заключение

Итак, мы показали, что при движении солитонов в рамках классической механики наблюдаются эффекты, связанные с конечностью скорости передачи информации. Если уравнения, описывающие динамику системы, обладают лоренцевской симметрией, то эти эффекты совпадают по форме с эффектами специальной теории относительности. Вместо скорости света в соответствующие формулы в этом случае входит скорость звука. Такие эффекты мы, как и многие другие авторы, называем релятивистскими. Уравнения, описывающие некоторые механические системы, могут и не иметь лоренцевской симметрии. Однако эффекты, связанные с конечностью скорости передачи информации, существуют и в этих

системах. На качественном уровне аналогия со специальной теорией относительности все же сохраняется. Так, в модели Косевича–Ковалева (модифицированная модель Френкеля–Конторовой с внутривещным ангармонизмом) ширина солитона уменьшается с ростом скорости, а его энергия при этом растет. Такую же качественную аналогию можно проследить и для других релятивистских эффектов. Однако математическое описание динамики солитонов в модели Косевича–Ковалева отличается от привычного лоренцевского. Поэтому мы использовали для таких эффектов термин "квазирелятивистские", указывающий как на их качественное сходство с эффектами специальной теории относительности, так и на некоторые отличия. Важнейшим из таких отличий является возможность сверхзвукового движения топологических солитонов в системах, не обладающих лоренцевской симметрией. Отметим, что прохождение солитоном звукового барьера не приводит ни к каким парадоксам, вроде нарушения принципа причинности или появления у солитона мнимой энергии. В отличие от сверхсветовых солитонов в активных средах, не переносящих информацию [61, 62], рассмотренные в данной статье сверхзвуковые солитоны распространяются в пассивных средах и переносят информацию.

Благодаря отсутствию лоренцевской симметрии классическая механика обладает гораздо большим разнообразием различных эффектов, связанных с конечностью скорости передачи информации, чем специальная теория относительности. Исследования в этой области начались сравнительно недавно, поэтому здесь можно ожидать новых результатов. Особый интерес, с нашей точки зрения, представляет изучение систем, поведение которых близко к лоренцевскому при малых скоростях солитонов, но отличается от лоренцевского при приближении скорости солитона к скорости звука. Примером такой системы является модель Косевича–Ковалева.

Большая часть результатов, особенно теоретических, относящихся к динамике солитонов вообще и топологических сверхзвуковых солитонов в частности, получена при изучении одномерных систем. Важным направлением будущих исследований является обобщение этих результатов на случай многомерных (двумерных и трехмерных) систем. Теория солитонов в таких системах сейчас интенсивно развивается [85]. В частности, было бы интересно теоретически описать сверхзвуковое движение дислокаций в кристаллах, используя имеющиеся данные о сверхзвуковом движении топологических солитонов в одномерных системах. Несомненно, такие работы будут полезны не только с фундаментальной, но и с прикладной точки зрения.

Исследование сверхзвуковых солитонов, как динамических, так и топологических, представляет значительный прикладной интерес. Такие солитоны (например дислокации) играют важную роль в процессах, происходящих в твердых телах при больших нагрузках. Их исследование важно для понимания таких явлений, как распространение ударных волн, детонация, тектонические процессы (и, в частности, землетрясения), пластичность и разрушение твердых тел, баллистический режим теплопроводности. Развитие нанотехнологий делает изучение динамики солитонов особенно актуальным, поскольку они играют большую роль в процессах, происходящих на наномасштабном уровне.

В данной работе мы ограничились рассмотрением солитонов в механических системах. Однако, как мы уже упоминали во введении, солитоны исследуются в самых разных разделах физики — от биофизики до физики элементарных частиц. Можно надеяться, что многие результаты, изложенные в нашем обзоре, найдут применение не только в механике, но и в других областях физики.

История науки свидетельствует о том, что изучение аналогий между различными явлениями не раз помогало получить новые результаты. Самый яркий пример в этой области — оптико-механическая аналогия, исследование которой привело к открытию уравнения Шрёдингера. Мы надеемся, что знание и использование аналогий между теорией классических солитонов, с одной стороны, и теорией относительности и калибровочными теориями поля — с другой, окажется полезным для специалистов в различных областях физики.

Авторы благодарны Л.В. Якушевич и А.В. Савину за любезно предоставленную информацию.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (гранты 04-02-17306 и 04-03-32119). А.И.М. благодарен за поддержку Фонду содействия отечественной науке.

Список литературы

1. Лэм Дж Л *Введение в теорию солитонов* (М.: Мир, 1983)
2. Хирт Дж, Лоте И *Теория дислокаций* (М.: Атомиздат, 1972)
3. Косевич А М *УФН* **84** 579 (1964)
4. Мусиенко А И, Копчик В А *Кристаллография* **40** 438 (1995)
5. Кадич А, Эделен Д *Калибровочная теория дислокаций и дисклинаций* (М.: Мир, 1987)
6. Тахтаджян Л А, Фаддеев Л Д *Гамильтонов подход в теории солитонов* (М.: Наука, 1986)
7. Захаров В Е, Маломед Б А, в кн. *Физическая энциклопедия* Т. 4 (Гл. ред. А М Прохоров) (М.: Большая Российская энциклопедия, 1994) с. 571
8. Mermin N D *Rev. Mod. Phys.* **51** 591 (1979)
9. Монастырский М И *Топология калибровочных полей и конденсированных сред* (М.: ПАИМС, 1995)
10. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Теория упругости* (М.: Наука, 1987)
11. Абловиц М, Сигур Х *Солитоны и метод обратной задачи* (М.: Мир, 1987)
12. Петвиашвили В И, Похотелов О А *Уединенные волны в плазме и атмосфере* (М.: Энергоатомиздат, 1989)
13. Давыдов А С *Солитоны в молекулярных системах* (Киев: Наукова думка, 1984)
14. Volovik G E *Phys. Rep.* **351** 195 (2001)
15. Раджараман Р *Солитоны и инстантоны в квантовой теории поля* (М.: Мир, 1985)
16. Scott A *Phys. Rep.* **217** 1 (1992)
17. Yakushevich L V *Nonlinear Physics of DNA* (Chichester: John Wiley & Sons, 1998)
18. Lakhno V D *J. Biol. Phys.* **26** 133 (2000)
19. Mornev O A, Aslanidi O V, Tsyganov I M *Macromol. Symp.* **160** 115 (2000)
20. Скотт Э *Волны в активных и нелинейных средах в приложении к электронике* (М.: Советское радио, 1977)
21. Зубова Е А, Балабаев Н К, Маневич Л И *ЖЭТФ* **115** 1063 (1999)
22. Зубова Е А и др. *ЖЭТФ* **118** 592 (2000)
23. Savin A V, Manevitch L I *Phys. Rev. E* **61** 7065 (2000)
24. Savin A V, Manevitch L I *Phys. Rev. B* **63** 224303 (2001)
25. Gardner C S et al. *Phys. Rev. Lett.* **19** 1095 (1967)
26. Toda M J. *Phys. Soc. Jpn.* **22** 431 (1967)
27. Toda M J. *Phys. Soc. Jpn.* **23** 501 (1967)
28. Тода М *Теория нелинейных решеток* (М.: Мир, 1984)
29. Senian A, Gabriel H J. *Phys.: Condens. Matter* **13** 4323 (2001)
30. Narayanamurti V, Varma C M *Phys. Rev. Lett.* **25** 1105 (1970)
31. Astakhova T Yu et al. *Phys. Rev. B* **64** 035418 (2001)
32. Collins M A, in *Advances in Chemical Physics* Vol. 53 (Eds I Prigogine, S A Rice) (New York: John Wiley & Sons, 1983) p. 225
33. Pnevmatikos St C.R. *Acad. Sci. Ser. II (Paris)* **296** 1031 (1983)
34. Балабаев Н К, Гендельман О В, Маневич Л И, в сб. *Проблемы нелинейной механики и физики материалов* (Под ред. Л И Маневича) (Днепропетровск: РИК НГА Украины, 1999) с. 37
35. Balabaev N K, Gendelman O V, Manevitch L I *Phys. Rev. E* **64** 036702 (2001)
36. Маневич Л И, Савин А В *Высокомолекулярная физика* **38** 1209 (1996)
37. Manevitch L I, Savin A V *Phys. Rev. E* **55** 4713 (1997)
38. Remoissenet M, Flytzanis N J. *Phys. C: Solid State Phys.* **18** 1573 (1985)
39. Нестеренко В Ф *ПМТФ* **24** (5) 136 (1983)
40. Лазариди А Н, Нестеренко В Ф *ПМТФ* **26** (3) 115 (1985)
41. Coste C, Falcon E, Fauve S *Phys. Rev. E* **56** 6104 (1997)
42. Беттех Дж, Пауэлл Дж, в кн. *Солитоны в действии* (Под ред. К Лонгрена, Э Скотта) (М.: Мир, 1981) с. 269
43. Peyrard M et al. *Phys. Rev. B* **33** 2350 (1986)
44. Ostrovsky L A, Potapov A I *Modulated Waves: Theory and Applications* (Baltimore, Md.: The Johns Hopkins Univ. Press, 1999)
45. Ерофеев В И, Кажяев В В, Семерикова Н П *Волны в стержнях. Дисперсия. Диссипация. Нелинейность*. (М.: Физматлит, 2002)
46. Дрейден Г В и др. *ЖТФ* **58** 2040 (1988)
47. Samsonov A M et al. *Phys. Rev. B* **57** 5778 (1998)
48. Sharon E, Cohen G, Fineberg J *Phys. Rev. Lett.* **88** 085503 (2002)
49. Савин А В *ЖЭТФ* **108** 1105 (1995)
50. Kosevich A M, Kovalev A S *Solid State Commun.* **12** 763 (1973)
51. Zolotaryuk Y, Eilbeck J C, Savin A V *Physica D* **108** 81 (1997)
52. Braun O M *Phys. Rev. E* **62** 7315 (2000)
53. Zolotaryuk A V, Pnevmatikos St, Savin A V *Physica D* **51** 407 (1991)
54. Pnevmatikos St, Tsironis G P, Zolotaryuk A V *J. Mol. Liq.* **41** 85 (1989)
55. Nagle J F, Tristram-Nagle S J. *Membrane Biol.* **74** 1 (1983)
56. Маневич Л И и др. *УФН* **164** 937 (1994)
57. Manevitch L I, Smirnov V V *Phys. Lett. A* **165** 427 (1992)
58. Енколюпан Н С, Маневич Л И, Смирнов В В *Хим. физ.* **10** 389 (1991)
59. Manevitch L I, Smirnov V V *J. Phys.: Condens. Matter* **7** 255 (1995)
60. Manevitch L I, Smirnov V V, in *Chemistry Reviews* Vol. 23, Pt. 2 (Eds P Yu Butyagin, A M Dubinskaya) (Amsterdam: Harwood Acad. Publ., 1998) p. 1
61. Wang L J, Kuzmich A, Dogariu A *Nature* **406** 277 (2000)
62. Сазонов С В *УФН* **171** 663 (2001)
63. Миркин Л И *Физические основы прочности и пластичности* (М.: Изд-во МГУ, 1968)
64. Weertman J, Weertman J R, in *Dislocations in Solids* Vol. 3 (Ed. F R N Nabarro) (Amsterdam: North-Holland Publ. Co., 1980) p. 1
65. Фушич В И, Наконечный В В *Укр. матем. журн.* **32** 267 (1980)
66. Mura T *Philos. Mag.* **8** 843 (1963)
67. Mura T *Micromechanics of Defects in Solids* 2nd ed. (Dordrecht: M. Nijhoff, 1987)
68. Hoover W G, Hoover N E, Moss W C *Phys. Lett. A* **63** 324 (1977)
69. Gumbsch P, Gao H *Science* **283** 965 (1999)
70. Shi S Q, Huang H, Woo C H *Comp. Mater. Sci.* **23** 95 (2002)
71. Koizumi H, Kirchner H O K, Suzuki T *Phys. Rev. B* **65** 214104 (2002)
72. Rosakis P *Phys. Rev. Lett.* **86** 95 (2001)
73. де Вит Р *Континуальная теория дисклинаций* (М.: Мир, 1977)
74. de Wit R J. *Res. NBS A Phys. Chem.* **77** 49 (1973)
75. Kossecka E, de Wit R *Arch. Mech. Stosowanej* **29** 749 (1977)
76. Nelson D R, in *Fundamental Problems in Statistical Mechanics* Vol. 5 (Ed. E G D Cohen) (Amsterdam: North-Holland, 1980) p. 53
77. Менский М Б *Группа путей: измерения, поля, частицы* (М.: Наука, 1983)
78. Günther H Z. *Angew. Math. Mech.* **56** 429 (1976)
79. Мусиенко А И, Копчик В А *Кристаллография* **41** 586 (1996)
80. Kröner E, in *Physics of Defects, Les Houches Session XXXV* (Eds R Balian, M Kléman, J-P Poirier) (Amsterdam: North-Holland, 1981) p. 215

81. Hehl F W, McCrea J D *Found. Phys.* **16** 267 (1986)
82. Katanaev M O, Volovich I V *Ann. Phys. (New York)* **216** 1 (1992)
83. Пономарев В Н, Барвинский А О, Обухов Ю Н *Геометродинамические методы и калибровочный подход к теории гравитационных взаимодействий* (М.: Энергоатомиздат, 1985)
84. Hehl F W et al. *Rev. Mod. Phys.* **48** 393 (1976)
85. Рыбаков Ю П, Санюк В И *Многомерные солитоны. Введение в теорию и приложения* (М.: Изд-во РУДН, 2001)

Classical mechanical analogs of relativistic effects

A.I. Musienko, L.I. Manevich

*N.N. Semenov Institute for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences,
ul. Kosygina 4, 119991 Moscow, Russian Federation
Tel. (7-095) 939-72 35
Fax (7-095) 137-82 84
E-mail: andrew@polymer.chph.ras.ru, lmanev@center.chph.ras.ru*

Classical mechanical analogs of relativistic effects are discussed which are observed for solitons moving in solids and formulas for which are similar to those of special relativity, but with the speed of light replaced by the speed of sound. It is shown that this similarity is consistent the correspondence between the theory of solitons and field theories (in particular, electrodynamics). Implications of Lorentz invariance violation in mechanical systems for the dynamic properties of solitons are discussed. It is shown that supersonic solitons (in particular, dislocations) can propagate in such systems.

PACS numbers: **03.30.+p**, 05.45.Yv, **11.15.-q**, 61.72.Lk

Bibliography — 85 references

Received 14 January 2003, revised 10 May 2004