Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. А. Лыках, Е. С. Сыркин, Нелинейная ориентационная динамика молекулярной цепочки, *ТМФ*, 2011, том 168, номер 2, 227–244

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6677>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.209.52.79

26 апреля 2023 г., 12:12:13

© 2011 г.

В. А. Лыках*, Е. С. Сыркин†

НЕЛИНЕЙНАЯ ОРИЕНТАЦИОННАЯ ДИНАМИКА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЦЕПОЧКИ

Исследуется нелинейная вращательная динамика молекулярной цепочки с квадрупольным взаимодействием как в дискретном, так и в континуальном случаях. Исходя из системы нелинейных дифференциально-разностных уравнений получены приближенные уравнения, описывающие возбуждения цепочки и сохраняющие начальную симметрию. Введены эффективный потенциал и нормальные координаты, с помощью которых система расцепляется на линейную и нелинейную части. Вследствие сильной анизотропии потенциала возникают узкие “долины” на плоскости углов. Движению вдоль долин соответствует более мягкое взаимодействие (нелинейные уравнения). Линейные уравнения описывают движение поперек долин (жесткое взаимодействие). Рассмотрены ситуации, когда выведенные нелинейные уравнения сводятся к уравнению синус-Гордон. Найдены интегралы движения и точные решения полученных приближенных уравнений. Единым образом описывается интервал энергий, охватывающий области упорядочения, ориентационного плавления и вращательного движения молекул в цепочке.

Ключевые слова: нелинейная динамика, нелинейные колебания и волны, молекулярный кристалл, фононы, нормальные моды, уравнение синус-Гордон, переходы твердое тело–жидкость.

1. ВВЕДЕНИЕ

Интенсивное исследование молекулярных кристаллов обусловлено их необычными электро- и теплопроводностью и структурными свойствами [1], [2]. Молекулярные криокристаллы [2] интересны применениями в низкотемпературной технике; кроме того, они имеют самые простые молекулы с известными взаимодействиями. Значительная часть свойств молекулярных кристаллов связана с вращением их молекул или молекулярных фрагментов, которые в случае линейной конфигурации описываются моделью жестких роторов (ротаторов). Однако даже такие почти модельные объекты, как молекулярные криокристаллы, имеют довольно сложную

*Национальный технический университет “Харьковский политехнический институт”, Харьков, Украина. E-mail: lykah@ilt.kharkov.ua

†Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины, Харьков, Украина. E-mail: syrkin@ilt.kharkov.ua

кристаллическую структуру с несколькими подрешетками и пространственным вращением роторов. Значительное упрощение описания с сохранением основных физических особенностей достигнуто при применении моделей цепочки к линейной динамике решетки и термодинамике молекулярных криокисталлов [2].

Аналитическое описание молекулярной динамики ротора и термодинамики развито для интервалов низких и высоких энергий [3]. Проблема состоит в том, чтобы создать теоретическое описание в среднем диапазоне энергий, особенно около точки ориентационного плавления.

Низкоразмерные системы очень важны и как модельный объект, и как объект для приложений. Реальными объектами могут быть адсорбированные структуры [4] или кристаллы с низкоразмерными мотивами. Модели цепочки – необходимая стадия исследования динамики и термодинамики более сложных систем таких, как трехмерные кристаллы [5], [6], а также нелинейной динамики атомных и молекулярных решеток [7]. Модель цепочки применяется к описанию линейной динамики решетки и термодинамики молекулярных криокисталлов [2]. Сложность моделей даже для одномерной молекулярной цепочки требует некоторых приближений для упрощения описания системы. Такие приближения – модельный потенциал и одномерное вращение в нелинейном рассмотрении [2]–[4].

В работах [8]–[10] нами были рассмотрены статика и нелинейная вращательная динамика молекулярной цепочки с реалистическим квадрупольным потенциалом [2] взаимодействия между молекулами. Показано, что двухподрешеточное упорядочение и вращательные возбуждения демонстрируют сильную анизотропию в пространстве углов; кроме того, существуют направления легкого возбуждения (“долины” на потенциале). Возбуждения, которые распространяются по долинам, не уничтожают сильной корреляции между вращающимися молекулами, но структурные данные могут показать вращательный беспорядок (плавление).

В настоящей статье из дискретных уравнений в континуальном пределе получены нелинейные уравнения для вращательных возбуждений молекул в широком интервале энергии: от равновесия через точку ориентационного плавления к вращательной неупорядочной фазе. Введены локальные нормальные координаты. Колебания поперек долин обусловлены более жестким взаимодействием и описываются линейными уравнениями. Колебания вдоль долины описываются более мягким взаимодействием, что приводит к сильному ангармонизму. Для таких колебаний получено уравнение синус-Гордон и проанализированы его решения в широком интервале энергии.

2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Наиболее часто встречаются ситуации, когда адсорбируемые молекулы могут вращаться только в плоскости подложки [4]. Такие молекулы имеют одну степень свободы. Трансляционные степени свободы заморожены подложкой, мы также пренебрегаем анизотропией этого взаимодействия. Именно рассмотрение нелинейности при больших углах позволяет найти устойчивую равновесную конфигурацию молекулярной цепочки с альтернативным вращательным упорядочением [8]–[10]. Это соответствует экспериментально наблюдаемым двумерным структурам [4] и отличается от заданного упорядочения молекул, которое было выбрано в моделях ранее (см. книги [2] и библиографию в них). При таких предположениях вращательная

потенциальная энергия молекул (энергия квадрупольного взаимодействия) в цепочке может быть записана следующим образом:

$$U_{\text{ch}} = \Gamma \left\{ a_0 N + \sum_{i=1}^N [a(\cos(2\phi_i) + \cos(2\phi_{i+1})) + b \cos(2(\phi_i - \phi_{i+1})) + c \cos(2(\phi_i + \phi_{i+1}))] \right\}, \quad (1)$$

$$\Gamma = \frac{3Q^2}{4R_0^5}, \quad a_0 = \frac{3}{4}, \quad a = \frac{5}{4}, \quad b = \frac{3}{8}, \quad c = \frac{35}{8}.$$

Здесь Q – квадрупольный момент молекулы, R_0 – расстояние между молекулами, ϕ_i – угол между осью молекулы и направлением радиус-вектора, соединяющего центры инерции молекул i и $i+1$ (вдоль цепочки). Потенциальная энергия (1) получена для взаимодействия ближайших соседей. Вычисление энергии молекулярной цепочки для различных симметричных упорядочений [8], [9] по формуле (1) дает минимальное значение для альтернативного упорядочения молекул с углами

$$\phi_{2n} = \frac{\pi}{2} + \pi k, \quad \phi_{2n+1} = \pi j$$

или

$$\phi_{2n} = \pi k, \quad \phi_{2n+1} = \frac{\pi}{2} + \pi j, \quad (2)$$

где $k, j, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ и индекс $k = 2n$ ($k = 2n+1$) определяет четные (нечетные) позиции. Стабильность этой структуры была подтверждена анализом потенциального рельефа и возбуждений [8]–[10].

Функция Лагранжа для вращательного движения молекул в цепочке имеет вид

$$L = K - U, \quad K = \frac{1}{2} \sum J_i \dot{\phi}_i^2. \quad (3)$$

Здесь U – потенциальная энергия (1), K – кинетическая энергия молекулы с моментом инерции J_i и угловой скоростью $\dot{\phi}_i$. Тогда вариация лагранжиана дает систему уравнений движения цепочки:

$$J_i \ddot{\phi}_i - 2\Gamma \{ 2a \sin(2\phi_i) + b [\sin(2(\phi_i - \phi_{i-1})) + \sin(2(\phi_i - \phi_{i+1}))] + c [\sin(2(\phi_i + \phi_{i-1})) + \sin(2(\phi_i + \phi_{i+1}))] \} = 0. \quad (4)$$

Эти уравнения исследованы в следующих случаях: 1) в линейном приближении [8], [9]; 2) в длинноволновом пределе ($k \rightarrow 0$) для произвольных амплитуд и нелинейности, когда все четные (и нечетные) позиции эквивалентны [10]; 3) при одновременном учете дисперсии среды и нелинейности колебаний [11].

Приведем краткий обзор результатов работы [10], необходимый для дальнейших исследований. Перепишем уравнения (4) для одинаковых молекул ($J_i = J_0$) двух подрешеток, имеющих различные состояния равновесия (2), и введем переменные для четных (ϕ) и нечетных (ψ) позиций молекул:

$$\begin{aligned} \ddot{\phi} - 2[2a \sin(2\phi) + 2b \sin(2(\phi - \psi)) + 2c \sin(2(\phi + \psi))] &= 0, \\ \ddot{\psi} - 2[2a \sin(2\psi) + 2b \sin(2(\psi - \phi)) + 2c \sin(2(\phi + \psi))] &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь введены безразмерное время и характерная частота

$$t \rightarrow \tau = t\omega_0, \quad \omega_0^2 = \frac{\Gamma}{J_0}. \quad (6)$$

Более удобна следующая форма записи уравнений и переменных:

$$\begin{aligned} \ddot{p} - 2\{4a \sin p \cos m + 4c \sin(2p)\} &= 0, \\ \ddot{m} - 2\{4a \sin m \cos p + 4b \sin(2m)\} &= 0, \end{aligned} \quad (7)$$

$$m = \phi - \psi, \quad p = \phi + \psi. \quad (8)$$

Умножим в системе (7) первое уравнение на $\dot{p}$ и второе на $\dot{m}$, просуммируем и проинтегрируем уравнения. Интеграл вращательного движения цепочки

$$W_{\text{ef}} = W_k + W_p \quad (9)$$

включает “кинетический” W_k и “потенциальный” W_p вклады:

$$W_k = \frac{1}{2}(\dot{p}^2 + \dot{m}^2), \quad W_p = 4[2a \cos p \cos m + b \cos(2m) + c \cos(2p)]. \quad (10)$$

Важная информация о динамике системы и потенциальном рельефе (10) получена из стационарных точек уравнений, определяемых условиями $\dot{m} = 0$ и $\dot{p} = 0$. Тогда система уравнений (7) может быть переписана как алгебраическая, которая расщепляется на несколько более простых подсистем.

Первая подсистема $\cos p = 0$, $\cos m = 0$ имеет решения

$$m_1 = \frac{\pi}{2} + \pi j, \quad p_1 = \frac{\pi}{2} + \pi n, \quad (11)$$

которые совпадают с условием (2) и на которых достигается минимум энергии цепочки: $W_{\min} = W_p(m_1, p_1) = -2(b + c) = -9.5$.

Вторая подсистема

$$a \cos m + 2c \cos p = 0, \quad \sin m = 0 \quad (12)$$

имеет решения $m_2 = \pi j$, $p_2 = \arccos(\pm a/2c)$, где знак плюс соответствует $j = 2n + 1$, а минус $-j = 2n$. Это нижние седловые точки эффективного потенциала с энергиями $W_{\text{SL}} = W_p(m_2, p_2) = -2((a^2/2c) + c) = -9, 10714$. Нижняя сепаратриса отделяет финитное ($W_{\min} < W_{\text{ef}} < W_{\text{SL}}$) и инфинитное движение (вращение) молекул в цепочке. $W_{\text{SL}} < W_{\text{ef}} < W_{\text{SH}}$ – область финитного изменения для p и инфинитного для m . Возбуждения по долинам потенциала не уничтожают сильную корреляцию между вращающимися молекулами, так что в j -й долине $p \simeq \pi/2 + \pi j$.

Третья подсистема $\sin p = 0$, $\sin m = 0$ имеет решения $m_3 = \pi j$, $p_3 = \pi n$. Решения и стационарные точки типа $j + n = 2i + 1$ соответствуют верхним седловым точкам эффективного потенциала и имеют энергию $W_{\text{SH}} = W_p(m_{3a}, p_{3a}) = 2(-2a + b + c) = +4.5$. Решения типа $j + n = 0, \pm 2, \pm 4, \dots$ – максимумы эффективного потенциала с энергиями $W_{\text{T}} = W_p(m_{3b}, p_{3b}) = 2(2a + b + c) = +14.5$. Четвертая подсистема $\sin p = 0$, $a \cos p + 2b \cos m = 0$ не имеет решения.

Рис. 1. Эффективный потенциальный рельеф W_p и динамические фазы в молекулярной цепочке с квадрупольным взаимодействием: а – стереоскопическое изображение, б и в – вид вдоль долины и перпендикулярно ей соответственно. Диапазоны динамических фаз следующие: I – упорядоченная фаза с энергией $W_{\min} \leq W \leq W_{SL}$; II – фаза коррелированного движения с энергией $W_{SL} \leq W \leq W_{SH}$, когда p изменяется финитно, а m – инфинитно; III – фаза коррелированного движения с энергией $W_{SH} \leq W \leq W_T$, когда p и m изменяются инфинитно; IV – разупорядочная фаза с энергией $W_T \leq W$.

Это полный набор особых точек системы. Знание особых точек уравнений движения позволяет перейти к более детальному анализу нелинейной динамики молекулярной цепочки [10]. Топология эффективного потенциального рельефа и ориентации молекул, соответствующие особым точкам, показаны на рис. 1–3 в работе [10]. Стереоскопическое изображение эффективного потенциального рельефа W_p и динамические фазы в молекулярной цепочке с квадрупольным взаимодействием показаны на рис. 1 настоящей работы.

3. ВЫВОД КОНТИНУАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Перепишем систему уравнений (4), следуя разделению молекул на две подрешетки (2), (5) и учитывая различие узлов в подрешетке. Введем переменные ϕ_{2m} для четных и ψ_{2m+1} для нечетных узлов:

$$\begin{aligned} \ddot{\phi}_i - \{2a \sin(2\phi_i) + b[\sin(2(\phi_i - \psi_{i-1})) + \sin(2(\phi_i - \psi_{i+1}))] + \\ + c[\sin(2(\phi_i + \psi_{i-1})) + \sin(2(\phi_i + \psi_{i+1}))]\} = 0, \\ \ddot{\psi}_{i+1} - \{2a \sin(2\psi_{i+1}) + b[\sin(2(\psi_{i+1} - \phi_i)) + \sin(2(\psi_{i+1} - \phi_{i+2}))] + \\ + c[\sin(2(\psi_{i+1} + \phi_i)) + \sin(2(\psi_{i+1} + \phi_{i+2}))]\} = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Модифицируем переменные m и p в формуле (8), чтобы учесть различие узлов:

$$m_i = \phi_i - \psi_{i+1}, \quad p_i = \phi_i + \psi_{i+1}. \quad (14)$$

Выделим эти переменные, находя сумму (для p) и разность (для m) уравнений (13). Тогда система уравнений может быть приведена к виду

$$\begin{aligned}\ddot{p}_i &= 2\{4a \sin p_i \cos m_i + \\ &+ 2b \sin(\phi_i - \phi_{i+2} - \psi_{i-1} + \psi_{i+1}) \cos(\phi_i + \phi_{i+2} - \psi_{i-1} - \psi_{i+1}) + \\ &+ 2c [\sin(2p_i) + \sin(\phi_i + \phi_{i+2} + \psi_{i-1} + \psi_{i+1}) \cos(\phi_i - \phi_{i+2} + \psi_{i-1} + \psi_{i+1})]\}, \\ \ddot{m}_i &= 2\{4a \sin m_i \cos p_i + \\ &+ 2b [\sin(2m_i) + \sin(\phi_i + \phi_{i+2} - \psi_{i-1} - \psi_{i+1}) \cos(\phi_i - \phi_{i+2} - \psi_{i-1} + \psi_{i+1})] + \\ &+ 2c \sin(\phi_i - \phi_{i+2} + \psi_{i-1} - \psi_{i+1}) \cos(\phi_i + \phi_{i+2} + \psi_{i-1} - \psi_{i+1})\}.\end{aligned}\quad (15)$$

По сравнению с системой (7) появились новые члены, содержащие b для $\ddot{p}_i$ и c для $\ddot{m}_i$. Разложим переменные ϕ и ψ вокруг значений, формирующих p_i и m_i , вводя безразмерную пространственную координату $\xi = x/R_0$ и отмечая, что $\Delta x = 2R_0$ и $\Delta \xi = 2$. Тогда разложение может быть записано как

$$\phi_{i+2} = \phi_i + 2\frac{\partial \phi_i}{\partial \xi} + 2\frac{\partial^2 \phi_i}{\partial \xi^2}, \quad \psi_{i-1} = \psi_{i+1} - 2\frac{\partial \psi_{i+1}}{\partial \xi} + 2\frac{\partial^2 \psi_{i+1}}{\partial \xi^2}. \quad (16)$$

После группировки углов и их производных получим континуальные дифференциальные уравнения для переменных $p_i \rightarrow p(\xi)$ и $m_i \rightarrow m(\xi)$. Предполагается относительно гладкое изменение ориентации молекул, т.е. производные являются относительно малыми: $p'', m'' \ll p', m' \ll p, m$, поэтому возможно дальнейшее разложение. Выделим углы и их производные в разные тригонометрические функции. Затем разложим функции в ряд по производным и удержим низшие из них (не больше, чем вторые или произведение первых). В результате может быть получена следующая система динамических нелинейных уравнений:

$$\begin{aligned}\ddot{p} &= 2\{4a \sin p \cos m - 4b[(m' + p'') \cos(2m) - 2m'p' \sin(2m)] + \\ &+ 4c[(m' + p'') \cos(2p) + (1 - m'^2 - p'^2) \sin(2p)]\}, \\ \ddot{m} &= 2\{4a \sin m \cos p + 4b[(p' + m'') \cos(2m) + (1 - m'^2 - p'^2) \sin(2m)] - \\ &- 4c[(p' + m'') \cos(2p) - 2m'p' \sin(2p)]\},\end{aligned}\quad (17)$$

где производные $p' = \partial p / \partial \xi$ и $p'' = \partial^2 p / \partial \xi^2$ (и аналогично для m', m'').

Система уравнений (17) получена в континуальном приближении и описывает любые нелинейные динамические процессы в молекулярной цепочке. Система имеет довольно сложную структуру как по обобщенным угловым координатам p и m , так и по их производным. По сравнению с уравнениями Ландау–Лифшица, описывающими ферромагнетики [12], [13], дисперсионные и нелинейные члены в системе (17) перепутаны. Привлекательная особенность систем (7) и (17) – симметрия по координатам p, m и параметрам взаимодействия при замене пары

$$p, c \leftrightarrow m, b. \quad (18)$$

4. ИНТЕГРАЛ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ НЕОДНОРОДНОЙ ЦЕПОЧКИ

Умножение первого уравнения системы (17) на dp и второго на dm , их суммирование и дальнейшее интегрирование дают интеграл системы

$$\frac{1}{2}(p^2 + m^2) + 4[2a \cos p \cos m + b(1 + p'^2 - m'^2) \cos(2m) + c(1 - p'^2 + m'^2) \cos(2p)] = C. \quad (19)$$

Дальнейшее упрощение возможно для стационарных возбуждений в размерных (θ, x, V, t) и безразмерных (ζ, ξ, w, τ) переменных:

$$\begin{aligned} p(\theta), \quad m(\theta), \quad \theta = x - Vt, \\ p(\zeta), \quad m(\zeta), \quad \zeta = \xi - w\tau. \end{aligned} \quad (20)$$

Здесь x, ξ, t, τ и V, w — координаты, времена (6) и скорости ($w = V/v_0, v_0 = R_0\omega_0$). После введения этих координат уравнения в системе (17) становятся обыкновенными дифференциальными. Зависящие от времени члены преобразуются как $\dot{p} \rightarrow wp'$ и $\dot{m} \rightarrow wm'$, где $p' = dp/d\zeta$ и $m' = dm/d\zeta$. Это дает интеграл системы в стационарном случае:

$$\frac{1}{2}w^2(p'^2 + m'^2) + 4[2a \cos p \cos m + b(1 + p'^2 - m'^2) \cos(2m) + c(1 - p'^2 + m'^2) \cos(2p)] = C. \quad (21)$$

Отметим характерные особенности полученных интегралов. Интегралы (19), (21) совпадают с выражением (10) для однородного состояния, когда пространственные производные равны нулю. Они имеют такую же симметрию относительно замены (18), как и исходная система дифференциальных уравнений (7), (17). Интегралы включают только квадраты первых производных. Пространственная дисперсия (производные по координате) относительно невелика. Эти интегралы могут быть применены к исследованию любых нелинейных динамических и стационарных или статических процессов в молекулярных цепочках с альтернативным упорядочением.

5. ЛОКАЛЬНЫЕ КООРДИНАТЫ. УРАВНЕНИЕ СИНУС-ГОРДОН

Даже в стационарном случае интеграл (21) недостаточен для интегрирования рассматриваемой двумерной системы. Действительно, необходимы два интеграла движения и два набора граничных условий [14]. В связи с этим воспользуемся методом пробных орбит [15], когда две переменные связаны некоторой зависимостью (сведение к одной переменной), и минимум энергии достигается при вариации параметров этой зависимости. Этот метод приближенного интегрирования хорошо применим для потенциалов степенного вида [15], но выбор орбиты неоднозначен даже для них. Молекулярная цепочка является более сложным случаем, так как ее потенциал состоит из тригонометрических функций. Поэтому необходимо выбрать некоторый путь (орбиту) в p - m -плоскости, который обеспечит минимум энергии для неоднородного состояния взаимодействующей молекулярной системы.

Согласно топологическому анализу [10] в случае длинных волн потенциальный рельеф для одномерной цепочки имеет очень глубокие долины. Нижние точки дна

Рис. 2. Локальные нормальные координаты в долинах и рельефы дна долины соответственно при $p \simeq -\pi/2$ (а, б) и $p \simeq +\pi/2$ (в, г). Криволинейная координата, совпадающая с дном долины – кривая, близкая к синусоиде; прямолинейные отрезки – локальные нормальные координаты, перпендикулярные к линии дна долины.

долины имеют энергию $W_{\min}$, нижние седловые точки – W_{SL} . Введем орбиту, совпадающую с дном долины (см. рис. 1). Этот выбор орбиты аналогичен построению доменной границы (ДГ) в ферромагнетиках [12]: в случае границ Блоха (вращение магнитного момента в плоскости ДГ) или границ Нееля (вращение перпендикулярно плоскости ДГ), когда фиксируется один из углов. Уравнение для дна долины может быть получено из первого уравнения системы (12):

$$\cos p = -\beta \cos m, \quad \beta = \frac{a}{2c} = \frac{1}{7}. \quad (22)$$

Введем криволинейную координату, совпадающую с дном долины (22). Наглядное представление о ее поведении дает рис. 2. Поскольку параметр β мал, при неограниченном изменении m координата p на дне долины слабо отклоняется от значений в минимумах (11), так что условие $p \simeq \pi/2 + \pi j = \text{const}$ хорошо удовлетворяется на дне любой долины. Причем криволинейная координата, следуя за пробной орбитой, изгибается в соседних долинах в противоположных направлениях. В каждой точке линии дна долины построим перпендикулярные к ней прямолинейные отрезки – локальные нормальные координаты (см. рис. 2).

Перенесем начало отсчета p на дно j -й долины и введем координату p_1 :

$$p = \frac{\pi}{2} + \pi j + p_1, \quad \sin p = \mp \cos p_1, \quad (23)$$

которая изменяется в пределах одной долины. В результате линеаризации по p_1 может быть выведена следующая система динамических нелинейных уравнений:

$$\begin{aligned}\ddot{p}_1 &= 8\{ \pm a \cos m - b[(m' + p_1'') \cos(2m) - 2m' p_1' \sin(2m)] - \\ &\quad - c[(m' + p_1'')(1 - 2p_1^2) + 2p_1(1 - m'^2 - p_1'^2)] \}; \\ \ddot{m} &= 8\{ \mp a p_1 \sin m + b[(p_1' + m'') \cos(2m) + (1 - m'^2 - p_1'^2) \sin(2m)] - \\ &\quad - c[-(p_1' + m'')(1 - 2p_1^2) + 4p_1 m' p_1'] \}.\end{aligned}\quad (24)$$

В уравнениях (23), (24) перед первым членом в фигурных скобках берется верхний знак для четных номеров долин $j = 2n$ и нижний – для нечетных $j = 2n + 1$. Для уравнений (24) интеграл системы (19) примет вид

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}(\dot{p}_1^2 + \dot{m}^2) + 4[\mp 2ap_1 \cos m + b(1 + p_1'^2 - m'^2) \cos(2m) - \\ - c(1 - p_1'^2 + m'^2)(1 - 2p_1^2)] = C.\end{aligned}\quad (25)$$

Используем параметризацию криволинейных координат имеющимися прямоугольными координатами m и p . Координата m однозначно может быть сопоставлена криволинейной координате вдоль дна долины, координата p – криволинейной координате, перпендикулярной дну долины. Обе координаты m и p лишь незначительно отклоняются от соответствующих им локальных нормальных криволинейных координат. Соотношение (22) позволяет исключить переменную p и $p' \simeq \mp \beta m' \sin m \ll m'$. Пренебрегая членами, содержащими $\alpha = \beta^2 \ll 1$, и учитывая оценку $b/c = 3/35 \ll 1$ (член с перепутанной дисперсией и нелинейностью мал), после группировки дисперсионных членов получим следующую форму (со смещенным нулевым уровнем) интеграла уравнений (21):

$$-\left(4c - \frac{1}{2}w^2\right)m'^2 - 4(b - \alpha c)(1 - \cos(2m)) = C, \quad (26)$$

$$-4cm'^2 + \frac{1}{2}\dot{m}^2 - 4(b - \alpha c)(1 - \cos(2m)) = C. \quad (27)$$

Сама система уравнений (17) (или (24)) примет вид

$$\begin{aligned}\ddot{m} &= 8[(b - c\alpha) \sin(2m) + cm''], \\ \ddot{p}_1 + 16c(p_1 - p_{10}(m)) + 8cp_1'' &= 0, \\ p_{10}(m) &\simeq \pm \beta \cos m - \frac{1}{2}m'.\end{aligned}\quad (28)$$

Третье из уравнений (28) перед $\beta \cos m$ для нечетных номеров долин имеет знак минус, для четных $j = 2n$ – знак плюс. Второе из уравнений (28) имеет простой физический смысл: в случае пространственно-однородной системы это гармонический осциллятор с параметрически смещающейся точкой равновесия $p_1 = p_{10}(m)$. В этом уравнении частота осциллятора не зависит от параметра – координаты m , что означает лучший выбор нормальных координат, чем в работе [11], где рассматривалось кубическое разложение и были введены нормальные координаты вблизи состояния равновесия и аппроксимации уравнений (4) нелинейным уравнением Шредингера. Уравнение для линейной нормальной моды в работе [11] имело параметрическую зависимость от m , точки равновесия и частоты осциллятора.

Система уравнений (28) записана в безразмерных переменных ξ, τ . Перепишем ее в размерных переменных x, t :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} &= \frac{1}{\lambda_0^2} \sin \varphi, & \varphi &= 2m - \pi, \\ \frac{\partial^2 p_1}{\partial x^2} + \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 p_1}{\partial t^2} + \frac{1}{\lambda_p^2} (p_1 - p_{10}(m)) &= 0, \end{aligned} \quad (29)$$

где введены переменная φ , характерные длины λ_0, λ_p и характерная скорость звука c_0 ротационных возбуждений:

$$\begin{aligned} \lambda_0^2 &= \frac{cR_0^2}{b - \alpha c}, & \lambda_p^2 &= \frac{R_0^2}{2}, & c_0^2 &= 8c\omega_0^2 R_0^2, \\ \omega_{00}^2 &= \frac{c_0^2}{\lambda_0^2} = 8(b - \alpha c)\omega_0^2, & \omega_{0p}^2 &= \frac{c_0^2}{\lambda_p^2} = 16c\omega_0^2. \end{aligned} \quad (30)$$

Характерные частоты ω_{00}, ω_{0p} описывают колебания в m - и p -подсистемах.

Первое из уравнений (29) полностью совпадает с каноническим видом уравнения синус-Гордон [16], [17]. Уравнение движения имеет стационарные решения, движущиеся со скоростью V . Тогда первое из уравнений (29) примет следующую форму:

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{V^2}{c_0^2}\right) \varphi'' &= \frac{1}{\lambda_0^2} \sin \varphi, \\ \theta &= x - x_0 - Vt, & \varphi''(\theta) &= \frac{\partial \varphi^2}{\partial \theta^2}. \end{aligned} \quad (31)$$

Второе из полученных уравнений (29) в однородном случае ($p_{10}(m) = 0$) описывает бегущие волны ($p_1(x, t) = p_0 e^{i(\omega_p t - k_p x)}$) с законом дисперсии

$$\omega_p^2 = \omega_{0p}^2 - c_0^2 k_p^2, \quad (32)$$

который совпадает с оптической (более жесткой) ветвью линейных волн из работ [8], [9] в пределе длинных волн $k_p \rightarrow 0$. Именно при этом условии были выведены уравнения (29).

В неоднородном случае второе из уравнений (29) описывает колебания под действием вынуждающей силы $p_{10}(m)$ (см. третье из уравнений (28)). Вдали от резонанса при медленном изменении переменной m решение второго из уравнений (29) примет вид

$$p_1(x, t) = p_{10}[m(x, t)] + p_0 e^{i(\omega_p t - k_p x)}, \quad (33)$$

где $p_{10}[m(x, t)]$ – медленно смещающееся вслед за m положение равновесия на дне долины. Условия резонанса в системе рассмотрены ниже.

6. ДИНАМИКА ЦЕПОЧКИ ПРИ ПРОМЕЖУТОЧНЫХ ЭНЕРГИЯХ

Уравнение (31) имеет два больших класса решений [16]: пространственноподобные $1 - V^2/c_0^2 > 0$ и времениподобные $1 - V^2/c_0^2 < 0$. Для джозефсоновских контактов первый класс решений называют “магнитными”, или М-типа, а вторые – “электрическими”, или Е-типа. Эти названия связаны с преобразованием Лоренца к состояниям, в которых существует только одно поле: магнитное (пространственноподобные) или электрическое (времениподобные).

Для пространственноподобных стационарных решений первое из уравнений (29) и уравнение (31) имеют интеграл движения E :

$$\left(1 - \frac{V^2}{c_0^2}\right)(\varphi')^2 = \frac{2}{\lambda_0^2}(E - \cos \varphi), \quad (34)$$

для времениподобных стационарных решений – интеграл движения B :

$$\left(\frac{V^2}{c_0^2} - 1\right)(\varphi')^2 = \frac{2}{\lambda_0^2}(B + \cos \varphi). \quad (35)$$

По аналогии с механикой интеграл B имеет смысл механической энергии обратного маятника длиной $l = 1$, а $\varphi = 2m - \pi$ – угла отклонения маятника от вертикали. При $-1 < B < 1$ маятник колеблется вокруг положения равновесия $B = -1$, т. е. $\varphi = 0$ или $m = \pi/2$. Уход из верхней равновесной точки ($B = 1$) и прибытие в нее занимают бесконечное время. При $B > 1$ маятник вращается вокруг точки подвеса. Направление вращения – топологический инвариант. Энергии $B < -1$ невозможны.

То же справедливо и для интеграла движения E . Единственное различие – положение равновесия $E = -1$ в $\varphi = \pi$ или $m = 0$. При $-1 < E < 1$ маятник колеблется около положения равновесия. Направление вращения задано при $E \geq 1$. Энергии $E < -1$ невозможны.

Формально введение интегралов уравнения E и B математически эквивалентно. Диапазон изменения для обоих интегралов $[-1; \infty)$. Уравнение синус-Гордон имеет решения в этом диапазоне для обоих интегралов [16].

Сравним интегралы (34) и (35) от одной переменной для первого из уравнений (29) и уравнения (31) с интегралом от двух переменных. После переноса начала отсчета в долину, введения переменной φ и разложения по малым p_1 системы уравнений (17), (28) имеют интеграл движения

$$C = \frac{1}{2} \left[\dot{p}_1^2 + \left(\frac{\dot{\varphi}}{2} \right)^2 \right] - 8ap_1 \sin \frac{\varphi}{2} + 4c(p_1^2 + 2p_1^2) - 4 \left[c + b \cos \varphi + c \left(\frac{\varphi'}{2} \right)^2 \right], \quad (36)$$

который при $p_1 \rightarrow 0$ принимает вид

$$C_\varphi = \frac{1}{2} \left(\frac{\dot{\varphi}}{2} \right)^2 + 4 \left\{ -(b - \alpha c) \cos \varphi - c \left(\frac{\varphi'}{2} \right)^2 \right\}. \quad (37)$$

Интегралы B и C_φ и диапазоны их изменения совпадают (см. рис. 3). Интеграл же E может изменяться только в диапазоне $-1 \leq E \leq 1$.

6.1. Пространственноподобные решения ($V < c_0$). При $|E| < 1$ периодические стационарные решения континуального уравнения описывают пространственные модулированные структуры:

$$m(\theta) = \frac{\pi}{2} + \arcsin[\operatorname{dn}(\xi_v, k)], \quad \xi_v = \frac{\theta}{\lambda_0 \sqrt{1 - V^2/c_0^2}}, \quad (38)$$

$$\theta = x - x_0 - Vt.$$

Зависимость $m(x)$ показана на рис. 4. Здесь $\operatorname{dn}(\xi_v, k)$ – эллиптическая функция Якоби с эллиптическим модулем k :

$$k^2 = \frac{E + 1}{2}, \quad 0 \leq k \leq 1. \quad (39)$$

Рис. 3. Сравнение интеграла W_p от двух переменных (см. рис. 1) и интегралов от одной переменной C_φ (жирная линия соответствует формуле (36), E (34) и B (35)). Сопоставление их математическому маятнику (увеличенные окружности): а – пространственноподобные решения (интеграл E), б – времениподобные решения (интеграл B). Жирные отрезки на осях E и B – допустимые области значений интегралов $E[-1; +1]$ и $B[-1; +\infty]$; φ – угол отклонения маятника.

Пространственный период в зависимости от x равен

$$l_x = 2\lambda_0 K(k) \sqrt{1 - \frac{V^2}{c_0^2}}. \quad (40)$$

В пределе $k \rightarrow 0$ или $E \rightarrow -1$ решения (38) преобразуются в малые колебания $\text{dn}(\xi_v, k) \rightarrow 1$ или $m \rightarrow \pi$. В пределе $k \rightarrow 1$ или $E \rightarrow 1$ периодическое решение (38) преобразуется в уединенный пик (солитон) $\text{dn}(\xi_v, k) \rightarrow \text{sch}(\xi_v)$.

При $E = 1$ континуальное уравнение движения цепочки имеет стационарное решение в виде уединенной доменной стенки (границы):

$$m(\theta) = \frac{\pi}{2} + 2 \arctg[\sigma e^{\xi_v}]. \quad (41)$$

В зависимости от топологического заряда ДГ это кинк ($\sigma = +1$) или антикинк ($\sigma = -1$), показанные на рис. 4. ДГ разделяет соседние минимумы $m = \pi/2$ и $3\pi/2$ потенциала W_p в формуле (11) или максимумы интеграла E .

6.2. Времениподобные решения ($V > c_0$). Континуальное уравнение движения имеет класс стационарных решений $\varphi(\theta)$, $\theta = x - x_0 - Vt$, которые движутся

Рис. 4. Углы поворота $m(x)$ молекул цепочки для пространственноподобных решений: а – периодическая структура при $k = 0.99$, т. е. $E = 0.996$; б – кинк $\sigma = +1$ (возрастающая функция) и антикинк $\sigma = -1$ (убывающая функция).

со скоростью $V > c_0$. Тогда в случае $W_p = B = -E$ интеграл движения (34) преобразуется к виду (35).

При $1 - V^2/c_0^2 < 0$, $|B| < 1$ уравнение движения имеет периодические стационарные решения, которые соответствуют колебаниям во времени около положения равновесия:

$$m(\theta) = \frac{\pi}{2} + \arccos[\operatorname{dn}(\xi_v, k)], \quad \xi_v = \frac{\theta}{\lambda_0 \sqrt{V^2/c_0^2 - 1}}. \quad (42)$$

Они показаны на рис. 5. Здесь $\operatorname{dn}(\xi_v, k)$ – эллиптическая функция Якоби с эллиптическим модулем k , определяемым соотношением

$$k^2 = \frac{B+1}{2}, \quad 0 \leq k \leq 1. \quad (43)$$

Пространственный период l_x решения равен

$$l_x = 2\lambda_0 K(k) \sqrt{\frac{V^2}{c_0^2} - 1}. \quad (44)$$

В пределе $k \rightarrow 0$ или $B \rightarrow -1$ периодическое решение (42) преобразуется в малые колебания $m \rightarrow \pi/2$. В пределах $k \rightarrow 1$ или $B \rightarrow 1$ ($B < 1$) периодическая функция (42) преобразуется в уединенную ступеньку $\operatorname{dn}(\xi_v, k) \rightarrow \operatorname{sch}(\xi_v)$ или $m = 0 \rightarrow \pi/2 \rightarrow \pi$. Это решение получено для того же интервала энергий, что и в работе [11], но при качественном совпадении оно имеет другую форму.

При $1 - V^2/c_0^2 < 0$, $B = 1$ континуальное уравнение движения имеет стационарное решение в виде уединенной доменной стенки между временными доменами:

$$m(\theta) = 2 \arctg[e^{\sigma \xi_v}]. \quad (45)$$

В зависимости от топологического заряда $\sigma = \pm 1$ это решение дает кинк ($\sigma = +1$, $m(-\infty) = 0$, $m(+\infty) = \pi$) или антикинк ($\sigma = -1$, $m(-\infty) = \pi$, $m(+\infty) = 0$). Вид кинков такой же, как на рис. 4, с учетом замены аргумента и пределов изменения m .

Рис. 5. Углы поворота $m(x)$ молекул цепочки для времениподобных решений: а – согласно формуле (46) при $B > 1$ (вращение, $\sigma = +1$), б – согласно формуле (42) при $|B| < 1$ (колебания). Периодические структуры при $k = 0.99$, т. е. $B = 0.996$ и $B = 1.004$. При $k \rightarrow 0$ график а превращается в прямую, а б – в синусоиду (малые колебания).

При $1 - V^2/c_0^2 < 0$, $B > 1$ уравнение движения имеет периодическое стационарное решение – вращение маятника вокруг оси:

$$m(x) = \frac{\pi}{2} + \arcsin[\sigma \operatorname{sn}(\xi_v, k)], \quad \xi_v = \frac{\theta}{k\lambda_0 \sqrt{V^2/c_0^2 - 1}}. \quad (46)$$

Оно показано на рис. 5. Здесь $\operatorname{sn}(\xi_v, k)$ – эллиптическая функция Якоби с эллиптическим модулем k :

$$k^2 = \frac{2}{B+1}, \quad 0 \leq k \leq 1. \quad (47)$$

Пространственный период l_x составляет

$$l_x = 4\lambda_0 k K(k) \sqrt{\frac{V^2}{c_0^2} - 1}. \quad (48)$$

В пределе $k \rightarrow 0$ или $B \rightarrow +\infty$ правая часть периодических решений (46) может быть представлена как $\operatorname{sn}(\xi_v, k) \rightarrow \sin(k\xi_v)$, что означает равномерное изменение угла в молекулярной цепочке. В пределах $k \rightarrow 1$ или $B > 1$, $B \rightarrow 1$ периодическое решение (46) может быть представлено как набор уединенных доменных стенок (45). Тогда кинк или антикинк должны быть транслированы с пространственным периодом (48).

6.3. Оценка точности решений. Оценим точность решений исходной континуальной системы уравнений (24) при использовании приближенного описания нелинейной подсистемы уравнением синус-Гордон (31). Воспользуемся методом невязок (см. например, с. 34–40 в книге [18]). Подстановка точных решений (38), (42), (45), (46) в уравнение синус-Гордон (31) дает тождественное равенство правой и левой частей. Найдем относительную невязку как отношение членов, отброшенных при выводе уравнения (31) из уравнений (24), к правой (левой) части уравнения

Рис. 6. Относительные невязки в зависимости от координаты и скорости при подстановке решений $m(x)$ приближенного уравнения синус-Гордон (31) в исходное континуальное уравнение (24): а – пространственноподобные решения (38), скорости $0 \leq V/c_0 \leq 0.7$; б, в, г – времениподобные решения, скорости $1.25 \leq V/c_0 \leq 2$. Колебания (42) при $|B| < 1$ (б), кинк (45) при $|B| = 1$ (в); вращение (46) при $B > 1$ (г). Относительные невязки периодических решений получены при $k = 0.9$ в интервале $-2K(k) \leq \xi \leq 2K(k)$.

(31). Для различных типов решений значение относительной невязки приведено на рис. 6 как зависимость от координаты и скорости. Видно, что даже при больших нелинейностях (больших значениях модуля эллиптической функции $k = 0.9$) относительная невязка составляет несколько процентов вдали от скорости звука. При приближении скорости нелинейной волны к скорости звука $V/c_0 \rightarrow 1$ относительная погрешность (невязка) возрастает до десятков процентов (см. рис. 6), что связано, по-видимому, с нарушением условий континуальности уравнений.

6.4. Запрещенные значения параметров. Условие резонанса между мягкой (ω_m) и жесткой (ω_p) подсистемами во втором из уравнений (29) выполняется при совпадении частот или их кратности:

$$\omega_p = n\omega_m, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (49)$$

Если в системе уравнений (24) удерживать поправки более высокой степени в виде $p_1(1 - m'^2)$, то второе из уравнений (29) дополнительно приобретет свойства уравнения Хилла, которое описывает параметрический резонанс в системе. Уравнение Хилла имеет неустойчивые решения при тех же резонансных частотах (49) [19].

Рис. 7. Взаимное расположение резонансных частот (семейство горизонтальных прямых ω_p/n , $n = 1, 2, 3, \dots$) и кривых зависимости частоты мягкой нелинейной моды от энергии $\omega_m(B)$ при колебательном ($-1 < B < 1$) и вращательном ($1 < B$) движении молекул ($V/c_0 \gg 1$ и $n > 3$) неустойчивые резонансные решения (49) (точки пересечения графиков) сгущаются вблизи седловой точки $B = 1$, кратность резонанса n при этом возрастает. Взаимное расположение меняется в зависимости от скорости волн.

Для мягкой динамической переменной m были получены периодические решения первого из уравнений (29) в виде эллиптических функций. Высшие гармоники в разложении эллиптических функций особенно существенны при больших нелинейностях (больших эллиптических модулях), т. е. вблизи седловых точек эффективно-го потенциала. Резонансное поведение системы, как правило, связано с целым комплексом довольно сложных явлений: возможны неустойчивость и появление новых видов волн, перекачка энергии между подсистемами и т. д. Это требует отдельного тщательного исследования резонансных явлений в системе (см. например, работу [20]). Во всяком случае, при выполнении условия резонанса (49) можно ожидать сложного неустойчивого поведения как жесткой (p_1), так и мягкой (m) подсистем в молекулярной цепочке. Таким образом, при резонансе (49) условие запрета на неограниченные решения уравнений дает соответствующие им запрещенные значения энергии или скорости.

Выше найдены решения для мягкой нелинейной подсистемы как в виде одиночных волн (кинков), так и в виде периодических возбуждений. В случае периодических решений при выполнении условия резонанса (49) между жесткой (p_1) и мягкой (m) подсистемами в молекулярной цепочке возможно сложное неустойчивое поведение обеих подсистем. Пространственные периоды l_x нелинейных решений в зависимости от энергии возбуждения и скорости движения по молекулярной цепочке даны соотношениями (40), (44), (48). Частоты колебаний в нелинейной подсистеме могут быть получены из периодов: $\omega_m = 2\pi/T_m$, где $T_m = l_x/V$. Подстановка этих соотношений в условия резонанса (49) непосредственно дает запрещенные значения параметров энергии и скорости. Для времениподобных решений зависимости частот от энергии $\omega_m(B)$ при фиксированной скорости приведены на рис. 7.

Частоты жесткой и мягкой подсистем для линейных колебаний молекулярной цепочки найдены в работах [8], [9], где они приведены также на графиках законов

дисперсии волн. Кратность резонанса $n = \omega_p / \omega_m$ имеет минимальное значение при $B \rightarrow -1$. С ростом энергии нелинейность растет, а частота колебаний ω_m падает и приближается к нулю вблизи седловых точек эффективного потенциала. С дальнейшим увеличением энергии вращательного движения частота нелинейной моды растет как $\omega_m(B) \sim B$, достигается резонанс $\omega_m = \omega_p$ т.е. при больших нелинейностях (больших эллиптических модулях) кратность резонанса n возрастает, запрещенные значения на рис. 7 сгущаются вблизи энергий $B = 1$. Расположение резонансных частот (точек пересечения графиков частоты мягкой нелинейной моды и резонансных частот) меняется в зависимости от скорости волн, так как $\omega_m \sim V / \sqrt{V^2 / c_0^2 - 1}$.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы впервые рассмотрели нелинейные возбуждения молекулярной цепочки с квадрупольным взаимодействием в интервале энергий, охватывающем точку ориентационного плавления. Ранее нами было показано двухподрешеточное альтернативное упорядочение молекул и введены две обобщенные координаты – сумма и разность углов поворота подрешеток. Выведены динамические континуальные уравнения двухподрешеточной цепочки с произвольной нелинейностью и относительно небольшой дисперсией. Найдены симметрия и интеграл системы уравнений. Используется найденная нами ранее сильная (гигантская) анизотропия молекулярного вращения на плоскости углов – долины эффективного потенциала. Для интегрирования уравнений на плоскости обобщенных координат вводится пробная траектория (орбита), совпадающая с дном долины. Построение нормальных криволинейных координат на плоскости углов дает возможность расцепить уравнения для линейных и нелинейных колебаний молекулярной цепочки. Вводится параметризация криволинейных координат через прямоугольные обобщенные координаты. Линейные колебания совершаются перпендикулярно долине и соответствуют более жесткой подсистеме; они устойчивы. Нелинейные колебания соответствуют мягкой подсистеме, поэтому для нее легко достигаются нестабильные состояния (точки бифуркации динамической системы). Для нелинейной подсистемы выведено уравнение синус-Гордон, позволяющее единым образом описывать режимы колебаний вокруг положения равновесия в упорядоченной фазе, переходные состояния – ДГ и переключение ориентации, вращательную фазу.

Область применимости полученного описания с помощью пробной траектории, линейных колебаний и уравнения синус-Гордон распространяется от точки равновесия до окрестностей верхней седловой точки, т.е. внутри долины эффективного потенциала. Этот интервал энергий на порядок больше, чем область существования ориентационно упорядоченной фазы. Выведенные динамические континуальные уравнения двухподрешеточной цепочки с произвольной нелинейностью применимы при всех значениях энергии, но при относительно небольшой дисперсии.

Таким образом, решена проблема описания динамики молекулярного кристалла (цепочки) с квадрупольным взаимодействием во всем интервале энергий – от малых (колебания вблизи упорядоченного состояния) через промежуточную область ориентационного плавления (седловые точки динамической системы) до коррелированных вращательных состояний с большими энергиями (см. фазы I и II на рис. 1). Напомним, что до настоящего времени динамические модели молекулярных цепочек описывали только состояния с малыми или большими энергиями [3].

Интересно применить полученные результаты в нелинейной динамике молекулярных кристаллов к исследованию их термодинамических и кинетических свойств [3] в интервале энергий, охватывающем точку ориентационного плавления.

Список литературы

- [1] J.-P. Farges(ed.), *Organic Conductors: Fundamentals and Applications*, Dekker, New York, 1994; G. Hadziioannou, P.F. van Hutten (eds.), *Semiconducting Polymers: Chemistry, Physics and Engineerings*, Wiley, Weinheim, 2005.
- [2] V. G. Manzhelii, Yu. A. Freiman, *Physics of Cryocrystals*, ed. A. A. Maradudin, AIP Press, New York, 1996; Б. И. Веркин, А. Ф. Прихотько (ред.), *Криокристаллы*, Наукова думка, Киев, 1983.
- [3] S. Lepri, R. Livi, A. Politi, *Phys. Rep.*, **377**:1 (2003), 1–80, arXiv:cond-mat/0112193.
- [4] D. Marx, H. Wiechert, *Surface Properties*, Adv. Chem. Phys., **95**, eds. I. Prigogine, S. A. Rice, Wiley, 2007.
- [5] М. Борн, Хуанг Кунь, *Динамическая теория кристаллических решеток*, ИЛ, М., 1958.
- [6] A. M. Kosevich, *The Crystal Lattice: Phonons, Solitons, Dislocations*, Wiley-VCH, Berlin, New York, 1999.
- [7] М. Тода, *Теория нелинейных решеток*, М., Мир, 1984.
- [8] V. A. Lykah, E. S. Syrkin, *Phys. status solidi (c)*, **1**:11 (2004), 3052–3056.
- [9] V. A. Lykah, E. S. Syrkin, *Physics of Low-Dimensional Structures*, **7/8** (2004), 103–116.
- [10] V. A. Lykah, E. S. Syrkin, *Central Eur. J. Phys.*, **3**:1 (2005), 61–68.
- [11] V. A. Lykah, E. S. Syrkin, *J. Phys.: Condens. Matter*, **20**:22 (2008), 224022.
- [12] A. Hubert, R. Schäfer, *Magnetic Domains: The Analysis of Magnetic Microstructures*, Springer, Berlin, New York, 1998.
- [13] А. М. Косевич, Б. А. Иванов, А. С. Ковалев, *Нелинейные волны намагниченности. Динамические и топологические солитоны*, Наукова думка, Киев, 1983.
- [14] Э. Камке, *Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям*, Наука, М., 1976.
- [15] R. Rajaraman, *Solitons and Instantons*, North-Holland Publ. Co., Amsterdam, New York, 1982.
- [16] А. С. Давыдов, *Солитоны в молекулярных системах*, Наукова думка, Киев, 1984.
- [17] О. М. Браун, Ю. С. Кившарь, *Модель Френкеля-Конторовой. Концепции, методы, приложения*, ред. А. В. Савин, Физматлит, М., 2008.
- [18] А. Н. Тихонов, А. Б. Васильева, А. Г. Свешников, *Дифференциальные уравнения*, Наука, М., 1985.
- [19] М. Абрамовиц, И. Стиган (ред.), *Справочник по специальным функциям*, Наука, М., 1979.
- [20] Yu. A. Kosevich, E. S. Syrkin, A. M. Kosevich, *Progr. Surface Science*, **55**:1 (1997), 59–111.

Поступила в редакцию 30.03.2010,
после доработки 22.11.2010