ПМТФ, № 4, 1970

О НЕКОТОРЫХ ЭФФЕКТАХ НЕЛОКАЛЬНОСТИ В ЦЕПОЧКЕ С ДАЛЬНОДЕЙСТВИЕМ В УПРУГОЙ СРЕДЕ

А. М. Вайсман, А. П. Путинцева

(Новосибирск)

В последнее время интенсивно развивается нелокальная теория упругой среды [1,3], тесно связанная с теорией кристаллической решетки. В связи с этим представляет интерес исследование эффектов нелокальности в рамках простейшей модели цепочки с силами дальнодействия. В данной работе приводятся некоторые новые результаты, полученные в этом направлении. В п. 1 рассматривается структура фундаментального решения уравнения движения цепочки. Показывается, что она определяется распределением корней оператора упругой энергии в комплексной плоскости волновых чисел, причем число существенных корней совпадает с числом взаимодействующих соседей. Приводятся выражения функций Грина для неограниченной цепочки и для основных граничных задач для полуцепочки. Для цепочек с локальными дефектами строится алгоритм, позволяющий находить функции Грина такой цепочки через функции Грина идеальной цепочки.

Развитый аппарат применяется в п.2 для исследования вопроса о статическом упругом взаимодействии дефектов во внешнем поле. Показывается, что соответствующая энергия отлична от нуля, когда в цепочке взаимодействуют не только ближайшие соседи. Ее зависимость от расстояния между дефектами носит немонотонный характер. В связи с этим данное взаимодействие может служить одним из механизмов образования устойчивых комплексов дефектов при их сближении на расстояние порядка радиуса сил дальнодействия. В заключение рассматривается взаимодействие дефекта с границей во внешнем поле.

1. Уравнение движения неоднородной цепочки, рассматриваемой в гармоническом приближении, имеет вид [4]

$$\rho(n)\ddot{u}(n,t)+\sum_{n'}\Phi(n,n')\,u(n',t)=q(n,t)$$

Здесь u и q — смещения и внешние силы, зависящие от координаты n и времени t; $\rho(n)$ — масса атома с номером n; $\Phi(n, n')$ — ядро оператора упругой энергии Φ, удовлетворяющее условиям

$$\Phi(n,n')=\Phi(n',n),\qquad \sum_{n'}\Phi(n,n')=0 \tag{1.1}$$

Отсюда следует, что $\Phi(n, n')$ представимо в виде

$$\Phi(n,n')=\psi(n)\,\delta(n-n')-\Psi(n,n'),\qquad \psi(n)=\sum_{n'}\Psi(n,n')$$

где $\Psi(n, n')$ может быть интерпретирована как жесткость эффективной упругой связи между атомами с номерами n и n'. В некоторых случаях удобнее использовать $\Psi(n, n')$, чем $\Phi(n, n')$, в особенности при рассмотрении граничных задач [5]. Предполагается, что число взаимодействующих соседей N конечно, т. е. $\Psi(n, n')=0$, если $|n-n'|>N$.

Наряду с функциями от n и t будем рассматривать их фурье-образы, для которых сохраним то же обозначение, но с аргументами k и ω. Например, [2]

$$u(k,\omega)=\sum_{n}\int dt\,u(n,t)\,e^{i(kn-\omega t)}$$

причем k принадлежит сегменту $|k|\leqslant\pi$.

Если цепочка однородна, то

$$\rho(n)=\rho_0,\qquad \Phi(n,\,n')=\Phi_0(n-n'),\qquad \Psi(n,\,n')=\Psi_0(n-n')$$

и уравнение движения в $(k,\,\omega)$-представлении принимает вид

$$\Phi_0(k,\,\omega)\,u(k,\,\omega)\equiv[-\omega^2\rho_0+\Phi_0(k)]\,u(k,\,\omega)=q(k,\,\omega) \tag{1.2}$$

где

$$\Phi_0(k)=2\sum_{n=1}^{N}\Psi_0(n)(1-\cos kn) \tag{1.3}$$

В силу периодичности $\Phi_0(k)$ полностью определяется заданием в полосе $|\operatorname{Re}k|\leqslant\pi$ комплексной плоскости k с отождествленными соответствующими граничными точками, так что допустимой областью k является комплексный цилиндр K.

Рассмотрим свойства $\Phi_0(k)$ для $k\in K$. Предположим для простоты, что эффективные упругие связи устойчивы, т. е. $\Psi_0(n)\geqslant 0$. Тогда при $k\in K$ функция $\Phi_0(k)$ не имеет корней на вещественной и мнимой осях, кроме двукратного корня $k_0=0$. Из частности и вещественности $\Phi_0(k)$ следует, что если k_m — нуль $\Phi_0(k)$, то нулями являются также $\bar{k}_m$, $-k_m$, $-\bar{k}_m$.

Согласно (1.3) функция $\Phi_0(k)$ будет полиномом $\cos k$ степени N; одним из нулей этого полинома будет $\cos k_0=1$. Обратная функция $G_0(k)=\Phi_0^{-1}(k)$ будет фурье-образом статической функции Грина для неограниченной цепочки. Эту функцию можно разложить на простейшие дроби

$$G_0(k)=\frac{1}{2c_0(1-\cos k)}-\sum_{m=1}^{N-1}\frac{\sin k_m}{\Phi_0'(k_m)(\cos k-\cos k_m)}\qquad(\operatorname{Im}k_m>0)$$

$$c_0=\sum_{n=1}^{N}n^2\Psi_0(n)$$

где c_0 имеет смысл упругого модуля в длинноволновом приближении.

Аналогичное разложение имеет место и для динамической функции Грина

$$G_0(k,\omega)=\Phi_0^{-1}(k,\omega)=-\sum_{m=0}^{N-1}\frac{\sin k_m(\omega)}{\Phi_0'(k_m(\omega))(\cos k-\cos k_m(\omega))}\qquad(\operatorname{Im}k_m(\omega)\geqslant 0)$$

где $k_m(\omega)$ — корни $\Phi_0(k,\,\omega)$.

Эта формула записана в предположении, что корни $k_m(\omega)$ простые. Обобщение на случай кратных корней, который возникает, например, для частот, соответствующих экстремумам на дисперсионной кривой, очевидно.

В $(n,\,\omega)$-представлении можем записать

$$G_0(n,\omega)=\sum_{m=0}^{N-1}\frac{ie^{ik_m(\omega)|n|}}{\Phi_0'(k_m(\omega))}\qquad(\operatorname{Im}k_m(\omega)\geqslant 0) \tag{1.4}$$

В статическом случаем имеем

$$G_0(n)=-\frac{|n|}{2c_0}+\sum_{m=1}^{N-1}\frac{ie^{ik_m|n|}}{\Phi_0'(k_m)}\qquad(\operatorname{Im}k_m>0) \tag{1.5}$$

В частности, при взаимодействии двух соседей последнее выражение принимает вид

$$G_0(n) = \frac{1}{2c_0}\left[-|n| + \frac{e^{ik_1|n|}}{2\sqrt{\alpha(1+\alpha)}}\right] \tag{1.6}$$

$$e^{ik_1} = -(\sqrt{1+\alpha} - \sqrt{\alpha})^2, \quad \alpha = \frac{\Psi_0(1)}{4\Psi_0(2)} \tag{1.7}$$

Фундаментальное решение уравнения (1.2) получается добавлением к (1.4) общего решения соответствующего однородного уравнения

$$\sum_{m=0}^{N-1} [\alpha_m e^{ik_m(\omega)n} + \beta_m e^{-ik_m(\omega)n}] \qquad (\operatorname{Im} k_m(\omega) \geqslant 0)$$

Здесь α_m, β_m — произвольные постоянные. Отсюда видно, что структура фундаментального решения полностью определяется распределением корней $\Phi_0(k, \omega)$, расположенных в комплексном цилиндре K.

При рассмотрении граничных задач удобно использовать функции Грина этих задач, которые можно получить из фундаментального решения надлежащим подбором постоянных α_m и β_m, чтобы удовлетворялись соответствующие граничные условия. Формулировку граничных задач с заданными в граничной области силами (смещениями) можно получить из рассмотренных условий в области сопряжения цепочек, состоящих из атомов разных сортов, при стремлении к нулю упругих связей, характеризующих взаимодействие между цепочками. Соответствующая граничная область, очевидно, определяется радиусом сил дальнодействия. Подобная формулировка задач ранее была рассмотрена в [5] для случая сплошной упругой среды с силами дальнодействия.

Опуская несложные, но достаточно громоздкие выкладки, аналогичные проделанным в [5], приведем выражения статических функций Грина для правой полуцепочки с взаимодействием двух соседей.

Для задачи с заданными в граничной области силами

$$G_0(n, n') = -\frac{1}{2c_0}\left[|n-n'| + n + n' - \frac{e^{ik_1|n-n'|} + e^{ik_1(n+n')}}{2\sqrt{\alpha(1+\alpha)}}\right] (n, n' \geqslant 0) \tag{1.8}$$

Эта функция удовлетворяет однородным силовым условиям в граничной области $n = 0, 1$.

Соответственно для задачи с заданными на границе смещениями получаем $(n, n' \geqslant 0)$

$$G_0(n, n') = -\frac{1}{2c_0}\left[|n-n'| - (n+n') + \frac{e^{ik_1(n+n')} - e^{ik_1(n-n')}}{2\sqrt{\alpha(1+\alpha)}} + \right.$$
$$\left. + \frac{(1-e^{ik_1n})(1-e^{ik_1n'})}{1+\alpha-\sqrt{\alpha(1+\alpha)}}\right] \tag{1.9}$$

Легко проверить, что удовлетворяются однородные граничные условия

$$G_0(0, n') = G_0(1, n') = 0 \quad (n' \geqslant 0)$$

Перейдем теперь к построению функции Грина для цепочки, содержащей локальные дефекты, ограничиваясь для простоты случаем статики. Способ построения будет аналогичен предложенному в [6]. Обозначим $V(n)$ характеристическую функцию области V, содержащей N_V точек, взаимодействие которых описывается при помощи «искаженных» упругих связей. Ядро оператора упругой энергии Φ можно представить в виде

$$\Phi(n, n') = \Phi_0(n-n') + \Phi_V(n, n')$$

где $\Phi_V(n, n')$ характеризует дефекты, так что $\Phi_V(n, n') \neq 0$ только при $n, n' \in V$. Очевидно, $\Phi_V(n, n')$ удовлетворяет условиям типа (1.1).

Уравнение для функции Грина $G(n, n')$ в операторной форме запишется следующим образом:

$$\Phi_0 G + \Phi_V G = I$$

где I — единичный оператор.

Применение к обеим частям последовательно операторов G_0 и $\Phi_V G_0$ дает

$$G = G_0 - G_0 \Phi_V G \qquad (1.10)$$

$$A_V G \equiv [\Phi_V + \Phi_V G_0 \Phi_V] G = \Phi_V G_0 \qquad (1.11)$$

Оператор A_V удовлетворяет условиям типа (1.1) и, следовательно, вообще говоря, не имеет обратного. Однако на специальном классе функций $f_V(n)$, сосредоточенных в области V и удовлетворяющих условию

$$\sum_n f_V(n) = 0$$

обратный оператор существует и определяется из уравнения

$$A_V A_V^{-1} = A_V^{-1} A_V = I_V$$

где I_V — оператор проектирования на указанное пространство функций. Его ядро имеет вид

$$I_V(n, n') = V(n) V(n') [\delta(n - n') - N_v^{-1}]$$

где $\delta(n - n')$ — символ Кронекера.

Применяя к обеим частям (1.11) оператор A_V^{-1} и подставляя результат в правую часть (1.10), получаем

$$G = G_0 + G_0 P_V G_0 \qquad (1.12)$$

$$P_V = -\Phi_V A_V^{-1} \Phi_V = -[\Phi_V^{-1} + I_V G_0 I_V]^{-1} \qquad (1.13)$$

Введенные здесь обратные операторы следует понимать в указанном выше смысле.

Подчеркнем, что в этих соотношениях G_0 может быть не только функцией Грина неограниченной цепочки, но и функцией Грина какой-либо граничной задачи. При этом указанные формулы будут давать выражение функции Грина соответствующей граничной задачи для цепочки с дефектами. Действительно, справедливость соответствующих однородных граничных условий для G непосредственно вытекает из вида формулы (1.12).

Рассмотрим для примера цепочку, в которой имеется один дефектный атом с номером m. Предположим, что искажены связи только между дефектом и его ближайшими соседями, так что

$$\Psi(m, m-1) = \Psi(m, m+1) = \Psi_0(1) + \psi$$

После соответствующих вычислений находим выражения для ненулевых элементов матрицы $P_V(n, n')$ $(n, n' = m-1, m, m+1)$

$$P_V(n, n') = \frac{1}{a_1 a_3 - a_2^2} \begin{Vmatrix} a_1 & -a_1 + a_2 & -a_2 \\ -a_1 + a_2 & a_1 - 2a_2 + a_3 & a_2 - a_3 \\ -a_2 & a_2 - a_3 & a_3 \end{Vmatrix} \qquad (1.14)$$

$$a_1 = \psi^{-1} + \Delta_{-1} G_0(m, m) \Delta_{-1}, \quad a_2 = \Delta_{-1} G_0(m, m) \Delta_1, \qquad (1.15)$$

$$a_3 = \varphi^{-1} + \Delta_1 G_0(m, m) \Delta_1$$

где Δ_1 обозначает операцию первой разности, примененной в зависимости от расположения знака по первому или второму аргументу $G_0(m, m)$, например

$$\Delta_{-1} G_0(m, m) \Delta_1 = [G_0(m, m) - G_0(m+1, m)] \Delta_1 =$$

$$= G_0(m, m) - G_0(m, m-1) - G_0(m+1, m) + G_0(m+1, m-1)$$

2. Функции Грина, как уже отмечалось в [4,6], оказываются весьма удобным аппаратом для исследования упругой энергии взаимодействия дефектов во внешнем поле. Рассмотрим сначала неограниченную цепочку, на которую действуют силы q. Ее энергию можно записать в виде

$$\Phi = \sum_{n} q(n)\, u(n) = \sum_{n,n'} q(n)\, G(n, n')\, q(n') \tag{2.1}$$

Обозначим через $u_0(n)$ — смещения идеальной цепочки, соответствующие силам $q(n)$, а через Φ_0 — ее энергию. Подставляя (1.12) в последнее выражение, получаем

$$\Phi = \Phi_0 + \Phi^*, \quad \Phi^* = \sum_{n,n' \in V} u_0(n)\, P_V(n, n')\, u_0(n') \tag{2.2}$$

где Φ^* можно интерпретировать как энергию взаимодействия дефектов с полем u_0.

Рассмотрим простейший пример, иллюстрирующий взаимодействие дефектов с полем однородной деформации $u_0(n) = n$. Пусть атомы с номерами 0, 1 и m, $m+1$ соединены дефектными связями с характеристиками $\Psi = \Psi_0(1) + \psi$. Подсчет энергии Φ^* для таких дефектов приводит к следующему выражению:

$$\Phi^* = -\frac{2}{\psi^{-1} + g(0) + g(m)}, \quad g(m) = \Delta_2 G_0(m) = \Delta_1 \Delta_{-1} G_0(m) \tag{2.3}$$

Для цепочки с взаимодействием двух соседей из (1.6) и (1.7) находим

$$g(m) = \frac{(-1)^m}{c_0} \frac{\sqrt{1+\alpha}}{\sqrt{\alpha}} \left(\sqrt{1+\alpha} - \sqrt{\alpha}\right)^{2|m|}$$

Это — знакопеременная функция m, исчезающая при $m \to \infty$. При этом Φ^* стремится к предельному значению

$$\Phi_\infty^* = -\frac{2}{\psi^{-1} + g(0)}$$

соответствующему удвоенной энергии взаимодействия изолированной дефектной связи с полем u_0. Разность $\Phi^* - \Phi_\infty^*$ можно интерпретировать как энергию взаимодействия дефектных связей между собой в поле однородной деформации. Эта энергия пропорциональна $g(m)$ и, следовательно, является немонотонной функцией m. Легко показать, что этот результат остается в силе и для цепочки с взаимодействием большего числа соседей. Наоборот, если взаимодействием между вторыми соседями можно пренебречь ($\alpha \to \infty$), то $g(m) \to 0$ и $\Phi^* - \Phi_\infty^* \to 0$.

Аналогичный эффект имеет место и при взаимодействии двух дефектных атомов с искаженными связями между атомом и его ближайшими соседями. Эти связи характеризуются тем же параметром ψ, что и выше. Расчет соответствующей энергии Φ^* для поля $u_0(n) = n$ дает выражение

$$\Phi^* = -\frac{2\left[2\psi^{-1} + \Delta_2\left(g(0) - g(m)\right)\right]}{\left(\psi^{-1} + g(0) + g(m-1)\right)\left(\psi^{-1} + g(0) + g(m+1)\right) - \left(g(1) + g(m)\right)^2} \tag{2.4}$$

где m — расстояние между дефектными атомами.

Немонотонный характер зависимости энергии взаимодействия таких дефектов от расстояния между ними означает, что указанное взаимодействие может являться одним из механизмов образования устойчивых комплексов дефектов при их сближении на расстояние порядка радиуса дальнодействия. Следует заметить, что отсутствие взаимодействия между дефектами в цепочке без сил дальнодействия является одномерным эффектом. В решетке при наличии внешнего поля дефекты взаимодействуют между собой причем соответствующая энергия затухает с ростом расстояния между ними по степенному закону. При «включении» сил дальнодействия добавятся знакопеременные экспоненциально затухающие члены, которые могут существенно изменить энергию на расстояниях порядка радиуса дальнодействия.