

Спектр нелинейных возбуждений модулированных нанокластеров

М.М. Богдан¹, А.С. Ковалев¹, Е.Ю. Малюта²

¹*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: bogdan@ilt.kharkov.ua*

²*Научно-технический центр электрофизической обработки НАН Украины
ул. Чайковского, 28, г. Харьков, 61002, Украина*

Статья поступила в редакцию 1 февраля 2005 г.

Исследована нелинейная динамика цепочки четырех связанных ангармонических осцилляторов с чередующимися частотными параметрами. Эта система рассматривается как элементарный фрагмент дискретной модулированной нелинейной среды, в частности магнитных и упругих нанокластеров и связанных оптических волноводов. Аналитически и численно изучены стационарные монохроматические колебания системы и проведена их полная классификация. Получена бифуркационная диаграмма для такой системы: найдены спектральные зависимости частот колебаний от интеграла числа состояний. Подробно исследован бифуркационный процесс возникновения возбуждения, являющегося аналогом щелевого солитона в конечномерной модулированной среде.

Досліджено нелінійну динаміку ланцюжка з чотирьох зв'язаних ангармонічних осциляторів із частотними параметрами, що перемежуються. Ця система розглядається як елементарний фрагмент дискретного модульованого нелінійного середовища, зокрема магнітних і пружних нанокластерів та зв'язаних оптичних хвильоводів. Аналітично і чисельно вивчено стаціонарні монохроматичні коливання системи і проведено їх повну класифікацію. Одержано біфуркаційну діаграму для такої системи: знайдено спектральні залежності частот коливань від інтеграла числа станів. Детально досліджено біфуркаційний процес виникнення збудження, яке є аналогом щілинного солітона в кінцевовимірному модульованому середовищі.

PACS: **61.46.+w**, 63.20.Pw, 63.20.Ry, **63.22.+m**

1. Введение

В последнее время в физике конденсированного состояния большое внимание уделяется исследованию нелинейных самолокализованных возбуждений. Их принципиальная роль при описании нелинейных явлений непосредственно следует из результатов математической теории солитонов. Эта теория рассматривает солитоны и бризеры как качественно новый базис фундаментальных нелинейных возбуждений [1,2].

Однако в реальных микроскопических средах при учете таких физических факторов, как дискретность и ограниченность размеров системы, дисперсия и диссипация, свойства таких нелинейных возбуждений могут значительно меняться. Это подтверждено результатами интенсивных численных

исследований нелинейной динамики дискретных систем со сложной внутренней структурой [3–5].

Трудности аналитического описания свойств нелинейных возбуждений в существенно дискретных системах обусловлены тем, что число интегрируемых моделей в этом случае крайне мало. Хорошо известно, что в приближении достаточно слабой нелинейности проблема нелинейной локализации для широкого круга приложений может быть обсуждена в рамках неинтегрируемого дискретного нелинейного уравнения Шредингера (ДНУШ) [4,6]. Такое уравнение возникает, например, при описании нелинейных свойств сверхрешеток — в моделях фотонного и фононного кристаллов [7,8]. Несложно показать, что солитоны бризерного типа в системах

с распределенными параметрами имеют свои аналоги уже в системе ДНУШ с двумя степенями свободы. Таким образом, физическую причину локализации возбуждений в нелинейных системах, т.е. существования солитонов, можно понять при рассмотрении простейшей модели для двух связанных ангармонических осцилляторов [9,10]. Более сложные объекты и явления нелинейной динамики для своей интерпретации требуют рассмотрения конечномерных динамических систем с большим числом степеней свободы [2,11].

Такая ситуация возникает в системах со сложной внутренней структурой, в частности в конечномерных модулированных средах. Примерами таких систем являются диатомные атомарные кластеры на поверхности кристалла [12], альтернированные сверхструктуры — фрагменты сложных сверхрешеток фотонных и фононных кристаллов. Такие же одномерные модели возникают в нелинейной оптике, где им соответствуют конечные наборы нелинейных волноводов с чередующимися значениями частотных параметров [8]. В электронных системах одномерными объектами с альтернированной зарядовой структурой, допускающими существование солитонов и квантовых бризеров, являются МХ-цепочки [13].

В низкотемпературной физике конечномерными модулированными системами являются магнитные молекулярные нанокластеры [14–16]. Общее число спинов в таких системах мало. Типичный пример замкнутой в кольцо магнитной молекулы — соединение Mn_6R_6 [16], в котором магнитные ионы Mn со спином $5/2$ чередуются с ионами радикалов R, имеющими спины $1/2$. Переходы в магнитном поле между состояниями магнитной молекулы с различными значениями полного спина — существенно квантовые явления. Однако основные свойства линейных колебательных спектров магнитной молекулы и ее слабо нелинейные колебания вблизи основного состояния могут быть рассмотрены в рамках классической конечномерной модулированной ДНУШ модели с последующим квазиклассическим квантованием спектров таких колебаний.

Особенностью спектра линейных возбуждений модулированной системы является наличие частотной щели, в которой линейные колебания запрещены. В нелинейной модулированной среде возможно существование так называемых щелевых солитонов с частотами, лежащими в щели спектра линейных волн. Впервые существование щелевых (брэгговских) солитонов было теоретически предсказано в работах [17,18] при исследовании распространения нелинейных волн в оптических средах с модулированным коэффициентом преломления. Простейшая кристаллическая структура, допускающая существование щелевых солитонов, — диатомная цепочка с чередующимися массами атомов [19–21]. Поскольку в случае модулированных нелинейных структур практически отсутствуют интегрируемые модели, на первый план выдвигается исследование простейших конечномерных фрагментов этих систем, отражающих основные свойства модулированных сред, их качественный анализ и численное моделирование их динамики.

В настоящей статье для понимания природы щелевых солитонов, причин их возникновения и трансформации с изменением частоты исследуется динамика фрагмента ангармонической диатомной цепочки из четырех частиц в рамках модели ДНУШ. В такой системе достаточно просто изучить монохроматические колебания, соответствующие стационарным состояниям нелинейной системы, и провести их полную классификацию, в частности найти аналоги щелевых и «внешелевых» солитонов. В работе получены квазиклассические спектры нелинейных одночастотных колебаний, подробно изучен бифуркационный механизм возникновения аналога щелевого солитона и особенности его трансформации в аналог «внешелевого» солитона на нижней границе щели линейных возбуждений.

В настоящей статье для понимания природы щелевых солитонов, причин их возникновения и трансформации с изменением частоты исследуется динамика фрагмента ангармонической диатомной цепочки из четырех частиц в рамках модели ДНУШ. В такой системе достаточно просто изучить монохроматические колебания, соответствующие стационарным состояниям нелинейной системы, и провести их полную классификацию, в частности найти аналоги щелевых и «внешелевых» солитонов. В работе получены квазиклассические спектры нелинейных одночастотных колебаний, подробно изучен бифуркационный механизм возникновения аналога щелевого солитона и особенности его трансформации в аналог «внешелевого» солитона на нижней границе щели линейных возбуждений.

2. Формулировка модели

Рассмотрим систему четырех связанных ангармонических осцилляторов с чередующимися частотными параметрами. Для простоты предполагаем циклические граничные условия, т.е. замкнем цепочку в кольцо. Гамильтониан этой простейшей модулированной системы может быть записан в следующем виде:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^4 \left\{ \tilde{\omega}_0^{(i)} |\psi_i|^2 - \frac{1}{2} |\psi_i|^4 + \varepsilon |\psi_i - \psi_{i-1}|^2 \right\}, \quad (1)$$

где $\psi_0 = \psi_4$ и $\tilde{\omega}_0^{(1)} = \tilde{\omega}_0^{(3)}$, $\tilde{\omega}_0^{(2)} = \tilde{\omega}_0^{(4)}$. Такая система описывает, например, «элементарный» фрагмент магнитной молекулы из четырех спинов с легкоосной анизотропией. При этом комплексные функции ψ_i связаны с компонентами спина следующим образом: $\psi_i = S_i^x + iS_i^y$. Параметры $\tilde{\omega}_0^{(1,2)}$ соответствуют собственным частотам линейных колебаний осцилляторов двух сортов, константа ε характеризует взаимодействие частиц между собой.

Соответствующие гамильтониану (1) уравнения динамики осцилляторов имеют следующий вид:

$$i\dot{\psi}_i - \omega_0^{(i)} \psi_i + |\psi_i|^2 \psi_i + \varepsilon (\psi_{i+1} + \psi_{i-1}) = 0, \quad (2)$$

где введены обозначения $\omega_0^{(i)} = \tilde{\omega}_0^{(i)} + 2\varepsilon$.

Отметим, что кроме интеграла движения — полной энергии системы E , уравнение (2) обладает дополнительным интегралом движения — числом квазиклассических состояний:

$$N = \sum_{i=1}^4 |\psi_i|^2. \quad (3)$$

Эта величина совпадает с адиабатическим инвариантом системы и при квазиклассическом квантовании определяет число квантовых состояний с энергией, меньшей E .

Система уравнений (2) имеет монохроматические решения следующего вида:

$$\psi_i = \varphi_i \exp(-i\omega t), \quad i = 1, 2, 3, 4, \quad (4)$$

которые описывают нелинейные стационарные колебания, характеризуемые единым параметром — частотой ω . Рассмотрим только вещественные амплитуды φ_i . После подстановки выражения (4) в систему (2) получаем систему нелинейных алгебраических уравнений:

$$(\omega - \omega_0^{(i)})\varphi_i + \varphi_i^3 + \varepsilon(\varphi_{i+1} + \varphi_{i-1}) = 0. \quad (5)$$

Различие частот осцилляторов характеризуется параметром $\gamma = \omega_0^{(2)}/\omega_0^{(1)}$. В дальнейшем будем обозначать $\omega_0^{(1)}$ через ω_0 , а $\omega_0^{(2)} = \gamma\omega_0$ без ограничения общности, параметр ε можно положить равным единице. Для определенности будем полагать $\gamma \geq 1$. Предел $\gamma \rightarrow 1$ отвечает однородной цепочке. Для случая однородной цепочки ($\gamma = 1$) соответствующая задача о монохроматических колебаниях была сформулирована и полностью решена в работе [5].

В линейном пределе спектр собственных частот системы состоит из четырех значений, отвечающих синфазным колебаниям с частотой $\omega_1 = \Omega_+ - \sqrt{\Omega_-^2 + 4}$, где $\Omega_{\pm} = \omega_0(1 \pm \gamma)/2$, противофазным колебаниям с частотой $\omega_4 = \Omega_+ + \sqrt{\Omega_-^2 + 4}$ и двум противофазным колебаниям в каждой из «подрешеток» с частотами $\omega_2 = \omega_0^{(1)}$ и $\omega_3 = \omega_0^{(2)}$. Этим колебаниям соответствуют общепринятые обозначения $(\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow)$, $(\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow)$, $(\uparrow 0 \downarrow 0)$, $(0 \uparrow 0 \downarrow)$. Длина и направление стрелки характеризуют относительную амплитуду и фазу колебаний частицы. Нули соответствуют неподвижным частицам.

С увеличением числа частиц в цепочке число частот в спектре будет возрастать и новые частоты будут заполнять интервалы частот (ω_1, ω_2) и (ω_3, ω_4) . При этом образуются две зоны спектра со щелью между частотами ω_2 и ω_3 . Таким образом, значения частот ω_2 и ω_3 играют роль границ щели спектра линейных возбуждений.

В нелинейном случае частоты монохроматических колебаний зависят от амплитуды и, следова-

тельно, от энергии системы и интеграла числа состояний N : $\omega_i = \omega_i(N)$. Для нелинейных колебаний в качестве спектральной характеристики естественно было бы использовать зависимость полной энергии от интеграла N : $E = E(N)$, которая фактически является квазиклассическим спектром системы. Нетрудно показать, что для одночастотных решений выполняется важное соотношение $\omega = dE/dN$. Поэтому основной характеристикой нелинейных колебаний, рассчитываемой в настоящей работе, является спектральная зависимость $\omega = \omega(N)$ для данного колебания, которая однозначно определяет и зависимость $E = E(N)$.

3. Аналитические результаты

Исходная система нелинейных уравнений (2) не может быть полностью проинтегрирована, поскольку для данной задачи не выполняется критерий интегрируемости (число независимых интегралов вдвое меньше общего числа уравнений). Тем не менее система алгебраических уравнений (5) допускает существенную редукцию к двухчастичной проблеме. В результате некоторые решения, в частности главные нелинейные колебания, отвечающие границам «нелинейной» щели, удастся найти точно.

Действительно, складывая и вычитая попарно уравнения системы (5) для 1-й и 3-й и 2-й и 4-й частиц, переходя к новым переменным $\varphi_1 - \varphi_3 = u$, $\varphi_1 + \varphi_3 = v$, $\varphi_2 - \varphi_4 = x$, $\varphi_2 + \varphi_4 = z$ и вводя обозначения $A = \omega_0 - \omega$ и $B = \gamma\omega_0 - \omega$, получаем систему нелинейных алгебраических уравнений для разностей и сумм амплитуд колебаний осцилляторов:

$$\begin{aligned} u[4A - (3v^2 + u^2)] &= 0, \\ x[4B - (3z^2 + x^2)] &= 0, \\ v[4A - (3u^2 + v^2)] - 8z &= 0, \\ z(4B - (3x^2 + z^2)) - 8v &= 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Очевидно, что система уравнений (6) распадается на четыре независимых системы уравнений:

Случай (I): $u = 0, x = 0,$

$$v(4A - v^2) - 8z = 0, \quad z(4B - z^2) - 8v = 0. \quad (7)$$

Случай (II): $u = 0, x^2 = 4B - 3z^2,$

$$v(4A - v^2) - 8z = 0, \quad z(z^2 - B) - v = 0. \quad (8)$$

Случай (III): $x = 0, u^2 = 4A - 3v^2,$

$$z(4B - z^2) - 8v = 0, \quad v(v^2 - A) - z = 0. \quad (9)$$

Случай (IV): $u^2 = 4A - 3v^2, x^2 = 4B - 3z^2,$

$$z(z^2 - B) - v = 0, \quad v(v^2 - A) - z = 0. \quad (10)$$

Таким образом, исходная задача для четырех частиц сводится фактически к четырем независимым задачам для двух связанных нелинейных осцилляторов, а весь частотный спектр для амплитуд нелинейных монохроматических колебаний системы (5) складывается из четырех наборов спектральных зависимостей $\omega_i = \omega_i(N)$, соответствующих случаям (I–IV). Отметим, что системы уравнений для амплитуд v и z в общем случае могут иметь до 9 вещественных решений (одно тривиальное $v = z = 0$ и четыре пары решений, отличающиеся только знаком). Это позволяет утверждать, что в сформулированной задаче для данного типа монохроматических колебаний имеется 19 нетривиальных спектральных зависимостей $\omega_i(N)$.

Главными нелинейными колебаниями системы являются синфазные и противофазные колебания, а также колебания, отвечающие границам «нелинейной» щели спектра. Для синфазных и противофазных нелинейных колебаний $\varphi_1 = \varphi_3$ и $\varphi_2 = \varphi_4$, поэтому задача нахождения соответствующих решений требует рассмотрения случая (I).

Используя связь между амплитудами колебаний и интегралом $N \equiv n/2 = (v^2 + z^2)/2$, можно получить выражения для v^2 и z^2 :

$$v^2 = \frac{n(\beta - n)}{\alpha + \beta - 2n}, \quad z^2 = \frac{n(\alpha - n)}{\alpha + \beta - 2n},$$

где $\alpha = 4A$, $\beta = 4B$. Подставляя полученные выражения в уравнение $(A - v^2)(B - z^2) = 64$, следующее из системы (7), приходим к уравнению четвертого порядка для n :

$$n^4 - 3Cn^3 + Dn^2 - Fn + G = 0. \quad (11)$$

Здесь введены обозначения $C = \alpha + \beta$, $D = \alpha\beta + 3C^2 - 256$, $F = C(2\alpha\beta + C^2 - 256)$, $G = C^2(\alpha\beta - 64)$.

Корнями уравнения (11) являются зависимости $n(\omega)$, обратив которые можно получить зависимости $\omega_i(N)$ и, прежде всего, спектральные зависимости, отвечающие синфазным и противофазным колебаниям частиц.

Случай (II) содержит точное решение $v = z = 0$, соответствующее верхней границе «нелинейной» щели ($0 \uparrow 0 \downarrow$), которое в терминах амплитуд колебаний осцилляторов имеет вид $(0, \sqrt{B}, 0, -\sqrt{B})$. Спектральную зависимость для этой границы щели легко найти в явном виде: $\omega_3(N) = \gamma\omega_0 - N/2$.

Точное решение, отвечающее нижней границе щели ($\uparrow 0 \downarrow 0$), содержится в случае (III) и имеет вид $(\sqrt{A}, 0, -\sqrt{A}, 0)$. Ему отвечает спектральная зависимость $\omega_2(N) = \omega_0 - N/2$.

В случае (IV) имеется еще одно точное решение, соответствующее колебанию типа ($\uparrow \uparrow \downarrow \downarrow$). Ам-

плитуды колебаний частиц для этого решения равны $(\sqrt{A}, \sqrt{B}, -\sqrt{A}, -\sqrt{B})$. Соответствующая решению спектральная зависимость также находится в явном виде: $\omega_b(N) = \omega_0(1 + \gamma)/2 - N/4$. Она бифуркационным образом отщепляется от верхней границы щели при частоте $\omega_* = \omega_0$.

Более того, можно показать, что все точки бифуркаций от верхней границы «нелинейной» щели могут быть найдены точно. Для этого представим решения, близкие к решению $(0, \sqrt{B}, 0, -\sqrt{B})$, в следующем виде: $\varphi_1 = \psi_1$, $\varphi_2 = \sqrt{B} + \psi_2$, $\varphi_3 = \psi_3$, $\varphi_4 = -\sqrt{B} + \psi_4$, где $\psi_i < 1$. Подставляя выражения для функций $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ и φ_4 в исходную систему уравнений (5), получаем следующую линеаризованную систему для малых добавок ψ_i :

$$\begin{aligned} (\omega - \omega_0)\psi_1 + (\psi_2 + \psi_4) &= 0, \\ 2(\gamma\omega_0 - \omega)\psi_2 + (\psi_1 + \psi_3) &= 0, \\ (\omega - \omega_0)\psi_3 + (\psi_2 + \psi_4) &= 0, \\ 2(\gamma\omega_0 - \omega)\psi_4 + (\psi_1 + \psi_3) &= 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Приравняв нулю детерминант матрицы, составленной из коэффициентов системы (12), приходим к уравнению для бифуркационных частот

$$(\gamma\omega_0 - \omega)(\omega_0 - \omega)[(\omega - \omega_0)(\gamma\omega_0 - \omega) - 2] = 0. \quad (13)$$

Решение $\omega = \gamma\omega_0$ тривиально. Решение с $\omega_* = \omega_0$, как отмечалось выше, отвечает отщеплению точного решения $(\sqrt{A}, \sqrt{B}, -\sqrt{A}, -\sqrt{B})$. Наконец, два корня

$$\omega_{1,2} = \frac{1}{2} \left(\omega_0(1 + \gamma) \pm \sqrt{\omega_0^2(1 - \gamma)^2 - 8} \right) \quad (14)$$

возникают лишь начиная с некоторого критического значения $\gamma_c = 1 + 2\sqrt{2}/\omega_0$. Как показывает анализ, спектральные зависимости $\omega_i(N)$, отвечающие этим двум бифуркационным решениям, с ростом N ведут себя весьма нетривиальным образом. Одна зависимость уходит в область нелинейной щели, другая отщепляется как обычная бифуркация, но затем с ростом N обе зависимости оказываются вне щели и заканчиваются в точке их пересечения при некотором значении N_c . При достижении параметром γ порогового значения γ_* эта точка становится четырехкритической (в ней сходятся четыре решения), и с этого момента существуют две бесконечные пересекающиеся линии аналога щелевого солитона и обычной первичной бифуркационной зависимости, отщепляющейся от верхней границы щели.

Таким образом, начиная со значения $\gamma_* = 1,750$ верхняя ветвь гиперболы 1 на рис. 1 отвечает точкам бифуркации аналога щелевого солитона, спектральная зависимость которого с ростом γ занимает все больше места в области щели. Интересным оказывается то обстоятельство, что все точки бифурка-

ции от верхней границы «нелинейной» щели для систем из 8, 12, 16 и любого другого числа частиц, кратного четырем, находятся в явном виде. На рис. 1 приведены также зависимости бифуркационных частот для аналогов щелевых солитонов для случаев 8 и 12 частиц. Видно, что критическое и пороговое значения γ_c и γ_* с ростом числа частиц довольно быстро убывают и для бесконечной системы стремятся к нулю.

В заключение отметим, что поскольку для частот бифуркаций в случае четырех частиц получаются уравнения четвертого порядка относительно ω , то на спектральных зависимостях нелинейных колебаний может появляться не более четырех точек бифуркаций. При этом нетрудно убедиться, что на линиях противофазных колебаний и нижней границе щели бифуркации отсутствуют.

4. Результаты численного счета

Поскольку полученная система нелинейных алгебраических уравнений (5) не может быть полностью решена аналитически, для ее решения были использованы численные методы. Расчет проводился с помощью программного пакета Maple 8. Для заданного значения параметра $\omega_0 = 4$ находились все вещественные решения систем уравнений (7)–(10), а следовательно, и решения системы (5) при фиксированном значении параметра γ и произвольном ω . В результате для данного значения ω был получен набор решений $\varphi_i^{(j)}$, где индекс i нумерует частицы, а j нумерует решения. Для каждого j -го решения системы (5) при заданном значении частоты рассчитывалось значение интеграла движения — числа состояний системы (3). Таким обра-

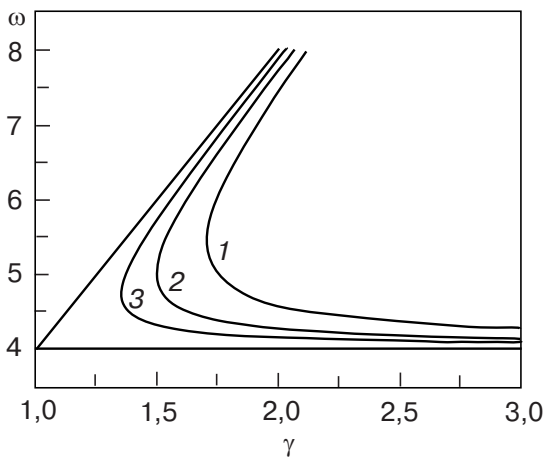


Рис. 1. Зависимости бифуркационных частот (верхние ветви гипербол) от параметра γ для аналогов щелевых солитонов в системах связанных ангармонических осцилляторов двух сортов: для 4 частиц — кривая 1; для 8 частиц — кривая 2; для 12 частиц — кривая 3.

зом, были получены спектральные характеристики системы: зависимости частот колебаний ω от интеграла N .

Численное интегрирование уравнений проведено нами для широкого интервала значений параметра γ . Основные результаты показаны на рисунках 2, 3 и 4 для $\gamma = 1,025$, $\gamma = 1,76$ и $\gamma = 20$.

Особенности бифуркационной картины для зависимостей $\omega = \omega(N)$ в случае малого отличия собственных частот частиц (для $\gamma = 1,025$) представлены на рис. 2.

Прежде всего видно, что в модулированной цепочке спектр линейных возбуждений имеет щель. Наличие у частиц двух разных собственных частот приводит к снятию вырождения для колебаний вида $(\uparrow 0 \downarrow 0)$. При γ , близких к единице, щель узкая, но достаточно быстро увеличивается с ростом γ . Как отмечалось в предыдущем разделе, от верхней границы щели при малых N отщепляется решение $(\sqrt{A}, \sqrt{B}, -\sqrt{A}, -\sqrt{B})$ при частоте, равной ω_0 . От образовавшегося решения при $N \approx 4$ отщепляется еще одно решение. Однако теперь, в отличие от случая однородной цепочки, на линии нового решения не возникает последующей бифуркации, а происходит снятие вырождения с возникновением решений (4) и (5), образующих «параболу» 2. Как будет видно в дальнейшем, положение этой «параболы» быстро меняется с ростом γ .

В случае однородной цепочки от зависимости для синфазных колебаний при конечном значении величины N бифуркационным образом отщеплялась

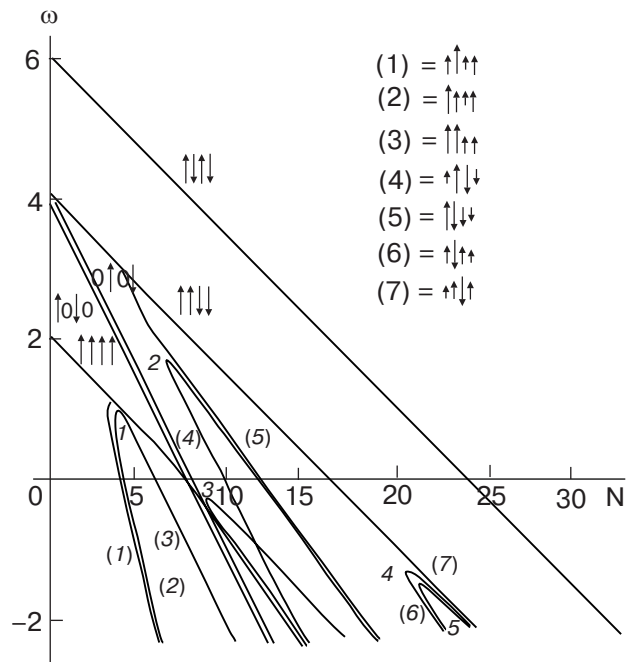


Рис. 2. Бифуркационная диаграмма одночастотных решений для системы четырех связанных ангармонических осцилляторов при $\gamma = 1,025$.

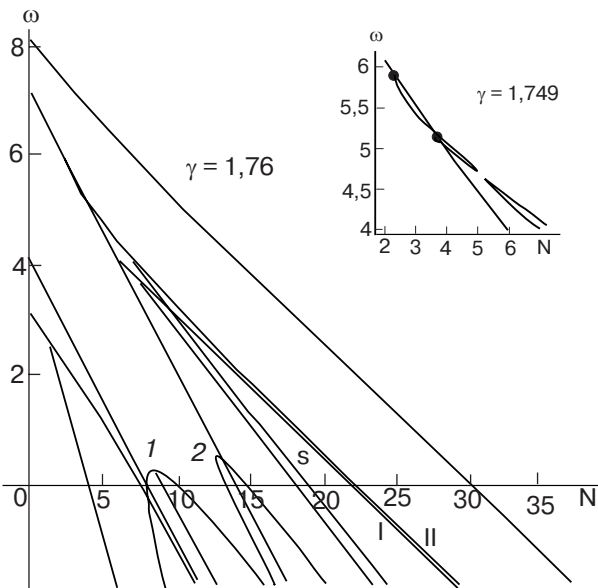


Рис. 3. Бифуркационная диаграмма одночастотных решений при $\gamma = 1,76$ (на вставке показан момент зарождения аналога щелевого солитона при значении чуть меньше критического $\gamma = 1,749 < \gamma_c = 1,750$).

дважды вырожденная зависимость для колебаний с сильной локализацией на одной частице. В случае разных частиц эта бифуркация расщепляется и вырождение снимается с образованием решений (1) и (2) (это аналогично снятию вырождения в системе двух осцилляторов с разными массами). От линии 2 теперь отщепляется линия 3, которая отвечает аналогу локализованного решения с центром между частицами в однородной цепочке. На линии синфазных колебаний при ω , близком к нулю, находится еще одна точка бифуркации. При небольшом увеличении параметра γ происходит слияние этой первичной бифуркации и ветви 2 в точке $\gamma_* = 1,05$ с образованием «параболы» 1. После объединения ветвей «парабола» 1 начинает смещаться в область нелинейной щели.

Для того чтобы описать порядок расположения спектральных зависимостей в окрестности $N = 10$, $\omega \approx -1$, зафиксируем значение частоты и будем отслеживать появление кривых по мере увеличения N . Линия синфазных колебаний проходит ближе всего к решению (3), затем расположены нижняя и верхняя границы «нелинейной» щели. Левая ветвь «параболы» 3 расположена правее линии верхней границы щели и наклонена под тем же углом к оси N . Еще правее проходит первичная бифуркация от линии синфазных колебаний, рядом с ней находится бифуркация, образовавшаяся на левой ветви «параболы» 3.

Наконец, обратим внимание на появление «парабол» 4 и 5 в результате снятия вырождения в моду-

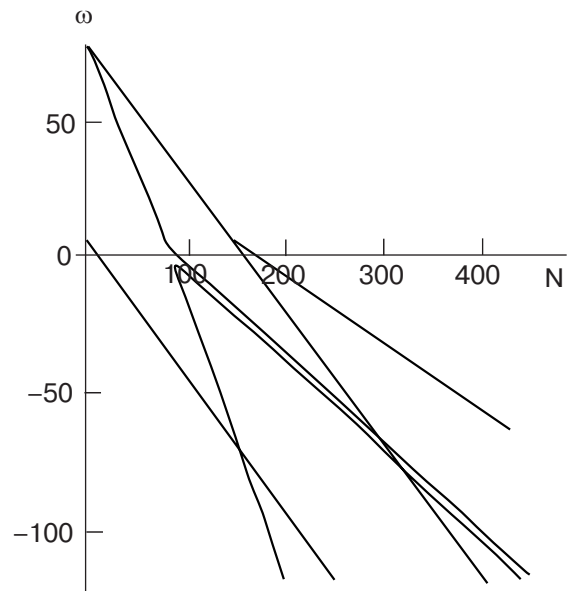


Рис. 4. Бифуркационная диаграмма одночастотных решений при $\gamma = 20$. Решение, соответствующее щелевому солитону, преобразуется во внешнещелевой солитон вблизи нижнего края спектра линейных волн.

лированной цепочке. Именно «парабола» 4 с ростом параметра γ принимает участие в образовании аналога щелевого солитона.

Как и в бесконечной модулированной среде, аналогу щелевого солитона в цепочке с малым числом частиц должно соответствовать решение, частота которого лежит в области «нелинейной» щели. Такое решение действительно возникает с ростом параметра γ , и происходит это пороговым образом после достижения параметром γ критического значения $\gamma_c = 1,707$. Отметим, что с ростом γ увеличиваются относительные размеры щели и основные бифуркации на линии синфазных колебаний и верхней границе щели смещаются в область меньших N . В то же время бифуркационные «параболы» 1 и 2 стремятся в область отрицательных частот, проникая в область щели, а острая вершина «параболы» 4 стремительно приближается к верхней границе щели по мере приближения к критическому значению γ_c . Бифуркационная диаграмма для запороговых значений параметра γ и в непосредственной близости от γ_c представлена на рис. 3 для $\gamma = 1,76$. На вставке показан момент зарождения аналога щелевого солитона. После достижения параметром γ критического значения $\gamma_c = 1,707$ на линии верхней границы щели появляются две точки бифуркации. Дальнейшая эволюция рожденных в этих бифуркационных точках решений происходит очень специфически и в полном соответствии с описанием этого процесса в предыдущем разделе при γ , чуть меньшем, чем пороговое значение $\gamma_* = 1,750$, имеет вид, показанный на вставке

рис. 3. При значении $\gamma = 1,76$ на рис. 3 видно, что вместо остроконечной «параболы» 4 уже существует ветвь, отвечающая целевому решению S , и ветвь обычной первичной бифуркации Π . Первая отщепляется и уходит в щель, затем выходит из нее и пересекает горизонтальную ось при $N \approx 18,7$. Вторая зависимость отщепляется вверх от границы щели и ведет себя как типичная первичная бифуркация. Заметим, что если следить за изменением γ , двигаясь из области больших его значений в область малых, то исчезновение ветви целевых солитонов происходит в момент приближения ее точки бифуркации к точке первичной бифуркации и завершается оно образованием «параболы», которая затем стремительно уходит в область отрицательных значений.

Наконец заметим, что «параболы» 3 и 5 в дальнейшем не показаны на бифуркационной диаграмме, поскольку они все глубже уходят в область отрицательных частот.

С ростом γ щель сильно увеличивается и точка бифуркации целевого решения приближается к слабо нелинейному пределу и соответствует частоте, близкой к $\gamma\omega_0$. В этом пределе при малых значениях N при малых и больших частотах существуют две качественно практически одинаковые картины бифуркаций. Фактически это соответствует случаю колебаний атомов с существенно разными массами, т.е. имеются две почти независимо колеблющиеся системы нелинейных осцилляторов с перенормированными эффективными связями. Причем как на линии верхней границы щели, так и на линии синфазных колебаний имеют место бифуркации рождения квазисолитонных состояний по сценарию, описанному Овчинниковым [9]. Но основной эффект, который становится очевидным в пределе больших γ , это преобразование аналога целевого солитона во «внещелевой» солитон. Оно происходит при частоте, близкой к нижнему краю спектра линейных колебаний, как это можно увидеть на бифуркационной диаграмме на рис. 4. На ней оставлены только линии, попадающие в область «нелинейной» щели и зависимость для колебания $(\sqrt{A}, \sqrt{B}, -\sqrt{A}, -\sqrt{B})$. Линия аналога целевого солитона отщепляется от верхней границы щели, доходит до частоты ω_0 и непрерывно преобразуется в линию «внещелевого» солитона. Напомним, что в бесконечной системе «внещелевому» солитону соответствуют локализованные колебания одного сорта атомов и нелокализованные колебания другого сорта атомов. Аналогичные изменения соотношений амплитуд прослеживаются и в исследуемой здесь конечномерной системе.

Важно подчеркнуть, что в случае $\gamma \gg 1$ многие характерные особенности спектральных зависимостей исследуемой системы — простые и двойные первич-

ные бифуркации, вторичные бифуркации, точки ветвления и др., повторяют наиболее существенные элементы динамики ангармонической цепочки с большим числом степеней свободы [20]. Возникновение целевого солитона и его трансформация во «внещелевой» солитон в изучаемом фрагменте модулированной среды и системе большого размера происходят по одинаковому сценарию. Наличие большего числа степеней свободы приводит к заполнению частотными зависимостями областей ниже и выше «нелинейной» щели, а бифуркационная картина в щели остается качественно одинаковой.

С точки зрения приложения полученных результатов к магнитным молекулам и системам нелинейных оптических волноводов с малым числом элементов отметим, что найденные решения для четырех осцилляторов не только демонстрируют основные закономерности образования квазисолитонных состояний, но и являются частью решений для систем, состоящих из 8, 12, 16 и т.д. осцилляторов. Нам представляется возможным возбуждение резонансными методами квазисолитонных состояний (включая щелевые солитоны) в магнитных и упругих нанокластерах и оптических волноводах. Следует иметь в виду, что синфазные колебания, соответствующие квазисолитонным состояниям и являющиеся дискретными аналогами бризеров в конечномерной системе, при заданном числе состояний имеют наименьшую энергию. Действительно, квазиклассические спектры всех найденных колебаний легко восстанавливаются по рассчитанным зависимостям $\omega_i = \omega_i(N)$. Это в основном первоначально квадратично растущие функции, которые достигают максимума в точках, где частоты обращаются в нуль, после чего с ростом амплитуд колебаний (интеграла N) убывают. Следует, однако, заметить, что в отличие от бесконечной и континуальной системы НУШ вопрос устойчивости квазисолитонных состояний системы ДНУШ не может быть решен лишь на основании анализа квазиклассических спектров и требует специального исследования [22].

Выводы

Таким образом, в рассмотренной модулированной конечномерной нелинейной системе спектр одночастотных стационарных состояний включает в себя главные нелинейные колебания и колебания, отщепляющиеся от главных в результате первичных и вторичных бифуркаций, а также колебания, возникающие попарно при конечных значениях энергии возбуждения (или интеграла N). Основные результаты исследования стационарных нелинейных колебаний такой системы сводятся к следующим положениям.

1. Получена полная бифуркационная диаграмма монохроматических решений в системе четырех ос-

цилляторов и проведена общая классификация их спектральных зависимостей $\omega_i = \omega_i(N)$ при произвольном соотношении частотных характеристик двух сортов осцилляторов.

2. Описаны эффекты, обусловленные модулированностью системы: образование щели, возникновение бифуркаций и расщепление (удвоение) бифуркационных кривых, образование автономных пар решений, которым соответствуют «параболические» спектральные зависимости, а также другие особенности, характерные для систем с дефектами.

3. Подробно исследован процесс возникновения решения, являющегося аналогом щелевого солитона в распределенной модулированной среде. Найдено критическое значение γ_c (отношение собственных частот осцилляторов), выше которого существуют щелевые решения солитонного типа.

4. Показано, что при больших размерах щели область существования такого решения велика, оно появляется бифуркационным образом, подобно квазисолитонному состоянию, отщепляющемуся от ветви однородных колебаний. При значении частоты, близком к нижнему краю щели линейных колебаний, аналог щелевого солитона преобразуется во «внещелевой» солитон. Предполагается, что квазисолитонные состояния, включая щелевые солитоны, могут быть возбуждены резонансными методами в магнитных и упругих нанокластерах и системах оптических волноводов.

Работа выполнена при частичной поддержке NATO Collaborative Linkage Program (Grant No.PST.CLG.980068).

1. В.Е. Захаров, С.В. Манаков, С.П. Новиков, Л.П. Питаевский, *Теория солитонов (метод обратной задачи)*, Наука, Москва (1980).
2. А.М. Косевич, А.С. Ковалев, *Введение в нелинейную физическую механику*, Наукова Думка, Киев (1989).
3. N. Flytzanis, St. Pnevmatikos, and M. Peyrard, *J. Phys.* **A22**, 783 (1989).
4. D.B. Duncan, J.C. Eilbeck, H. Feddersen, and J.A.D. Wattis, *Physica* **D68**, 1 (1993).
5. M. Peyrard, *Physica* **D123**, 403 (1998).
6. J.C. Eilbeck, P.S. Lomdahl, and A.C. Scott, *Physica* **D16**, 318 (1985).
7. А.М. Косевич, М.А. Мамалуй, *ЖЭТФ* **122**, 897 (2002).
8. Yu.S. Kivshar and G.P. Agrawal, *Optical Solitons. From Fibers to Photonic Crystals*, Academic Press, Elsevier Science, San Diego (2003).
9. А.А. Овчинников, *ЖЭТФ* **57**, 263 (1969).

10. S. M. Jensen, *IEEE J. Quantum Electron.* **QE18**, 1580 (1982).
11. А.С. Ковалев, М.М. Богдан, *Физика многочастичных систем* **13**, 20 (1988).
12. A. Franchini, V. Bortolani, and R.F. Wallis, *Phys. Rev.* **B53**, 5420 (1996-I).
13. N. Kuroda, Y. Wakabayashi, M. Nishida, N. Wakabayashi, M. Yamashita, and N. Matsustita, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2510 (1997).
14. W. Wernsdorfer and R. Sessoli, *Science* **284**, 133 (1999).
15. А.К. Звездин, В.В. Костюченко, В.В. Платонов, В.И. Плис, А.И. Попов, В.Д. Селемир, О.М. Таценко, *УФН* **45**, 9 (2002).
16. V.V. Kostyuchenko, I.M. Markevtsev, A.V. Philippov, V.V. Platonov, V.D. Selemir, O.M. Tatsenko, A.K. Zvezdin, and A. Caneschi, *Phys. Rev.* **B67**, 184412 (2003).
17. W. Chen and D.L. Mills, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 160 (1987).
18. D. Mills and J. Trullinger, *Phys. Rev.* **B36**, 947 (1987).
19. St. Pnevmatikos, N. Flytzanis, and M. Remoissenet, *Phys. Rev.* **B33**, 2308 (1986).
20. S.A. Kiselev, S.R. Bickham, and A.J. Sievers, *Phys. Rev.* **B50**, 947 (1994).
21. A.S. Kovalev, O.V. Usatenko, and A.V. Gorbach, *Phys. Rev.* **E60**, 2309 (1999).
22. A.V. Gorbach and M. Johansson, *Eur. Phys. J.* **D29**, 73 (2004).

Spectrum of nonlinear excitations of modulated nanoclusters

М.М. Богдан, А.С. Ковалев, and Е. Малуца

The nonlinear dynamics of a chain consisting of four coupled anharmonic oscillators with alternative frequency parameters is investigated. The system is considered as an elementary fragment of a discrete modulated nonlinear medium, in particular magnetic and elastic nanoclusters, and bound optical waveguides. The stationary monochromatic oscillations of the system are studied analytically and numerically, and their complete classification is carried out. A bifurcation diagram for the system is obtained: the spectral dependences of frequencies on the integral of the number of states are found. The bifurcation process of arising the excitation onset which is the analogue of a gap soliton in a finite-dimensional modulated system is investigated in detail.