УДК 517.9+534

Наталя Українець,
студентка факультету математики, фізики
і комп’ютерних наук
Вінницького державного педагогічного університету
імені Михайла Коцюбинського,
Сергій Бак,
докт. фіз.-мат. наук, професор,
професор кафедри математики та інформатики
Вінницького державного педагогічного університету
імені Михайла Коцюбинського,
Галина Ковтонюк,
канд. пед. наук, доцент,
доцент кафедри математики та інформатики
Вінницького державного педагогічного університету
імені Михайла Коцюбинського

ЗАСТОСУВАННЯ МОДЕЛІ ФРЕНКЕЛЯ-КОНТОРОВОЇ

Анотація. *У статті розглянуто фізичні моделі, для побудови і дослідження яких можна використати модель Френкеля-Конторової: механічна модель ланцюга зв’язаних маятників, модель адсорбованих атомів на поверхні кристала, моделі джозефсонівських контактів та нелінійні моделі динаміки ДНК.*

Ключові слова: *модель Френкеля-Конторової, рівняння синус-Ґордона, ланцюг маятників, адсорбовані атоми, джозефсонівські контакти, ДНК.*

Abstract. *The article considers physical models that can be constructed and studied using the Frenkel-Kontorova model: a mechanical model of a chain of coupled pendulums, a model of adsorbed atoms on a crystal surface, models of Josephson contacts, and nonlinear models of DNA dynamics.*

Key words: *Frenkel-Kontorova model, sine-Gordon equation, pendulum chain, adsorbed atoms, Josephson contacts, DNA.*

Вступ. Різноманітні задачі сучасної теоретичної фізики зводяться до нелінійних диференціальних рівнянь, серед яких можна виділити рівняння, які мають природну геометричну інтерпретацію. Осмислення геометричної природи нелінійних рівнянь дозволяє реалізовувати геометричні підходи до опису реальних фізичних процесів, що визначаються цими рівняннями. Найвідомішим прикладом таких рівнянь є рівняння синус-Ґордона, дискретний варіант якого описує модель Френкеля-Конторової. Ця модель описує ланцюг класичних частинок, зв'язаних зі своїми сусідами, який взаємодіє із зовнішнім періодичним потенціалом (див. [7]).

Такі моделі цікаві з огляду на численні застосування у фізиці (див., наприклад, [1-3]).

Зауважимо, що дикретні рівняння типу синус-Ґордона на вивчались в працях [4-6, 8-9, 14, 15, 17].

Мета статті: розглянути моделі, які можна побудувати за допомогою модифікації моделі Френкеля-Конторової

Для початку розглянемо загальний підхід, який використовується для побудови моделі Фернкеля-Конторової. Перш за все з вихідної дискретної нелінійної системи, яка за звичай є достатньо складною, потрібно відокремити низькорозмірну підсистему та описати частину, яка залишиться, як *підложку*, вводячи для врахування взаємодії з нею деякий ефективний потенціал. Елементи цієї одновимірної дискретної підсистеми будуть виконувати роль ефективних атомів в моделі Френкеля-Конторової. У багатьох випадках ці елементи дійсно відповідають реальним атомам. Але вони також можуть моделювати цілі групи атомів, як у випадку молекулярних ланцюгів типу ДНК. Вони можуть відповідати спінам магнітного ланцюга. Або навіть описувати деякі складні об'єкти, такі, як точкові джозефсонівські контакти на деякій ґратці. В моделі ефективні атоми взаємодіють зі своїми сусідами, і найпростіша взаємодія – це лінійний зв'язок між найближчими сусідами. В системах, які описуються моделями типу моделі Френкеля-Конторової, ефективна під ложка повинна мати кристалічну структуру. У найпростішому випадку, коли структура відповідає елементарній комірці (вузлу) Браве, тобто один атом припадає на одиничну комірку, в розкладі періодичного потенціалу в ряд Фур'є можна залишити тільки перший член і отримати синусоїдальний потенціал підложки.

В межах цього підходу стандартна модель Френкеля-Конторової може описати реалістичну фізичну модель тільки, якщо її одновимірна підсистема і під ложка мають різну природу, тобто атоми в моделі Френкеля-Конторової є легкими частинками, в той час як потенціал утворений важкими частинками, які можна вважати нерухомими. Фактично, така ситуація відповідає багатьом фізичним системам. Наприклад, у фізиці поверхні модельні атоми відповідають адсорбованим атомам, а під ложка відповідає поверхні кристала, або в ланцюгах водневих зв'язків, де атомами моделі будуть легкі атоми водню, в той час як потенціал підложки утворюють важкі атоми кисню. Однак навіть у таких випадках, як теорія дислокацій, де атоми і під ложка мають одну і ту ж природу, модель Френкеля-Конторової залишається дуже корисним наближенням, що дозволяє описати велику кількість нетривіальних явищ динаміки таких систем, часто навіть на простому якісному рівні.

Модель ланцюга маятників

Одну із найпростіших макроскопічних моделей, що описують динаміку моделі Френкеля-Конторової, вперше запропонував А. Скотт [10]. Це експериментальна механічна лінія трансмісій, яка ефективно використовується для спостереження кінків та вивчення їх властивостей. Потім Скотт показав, що така механічна система може бути легко сконструйована як лінія гвинтів довжини L, вкручених в мідні циліндри, які з'єднані сталевими пружинами і підтримуються у горизонтальному положенні рояльною струною. Змінюючи жорсткість пружини, можна одержати ланцюг, який описується або квазі-континуальною, або строго дискретною моделлю Френкеля-Конторової.

Ця система представляє собою ланцюг маятників, в якому кожен маятник з'єднаний зі своїми сусідами пружинами (рис. 1). Основною змінною, що характеризує стан n-го маятника, є кут обертання θ_n. Рівняння руху для обертальних ступенів свободи можна записати у вигляді

$$I\frac{d^2\theta_n}{dt^2}=\beta\left(\theta_{n+1}+\theta_{n-1}-2\theta_n\right)-mgL\sin\theta_n, \tag{1}$$

де $I=mL^2$ – момент інерції одного ізольованого маятника масою m і довжиною

L, β – крутильна жорсткість пружини, що з'єднує два сусідні маятники, g – прискорення вільного падіння. В рівнянні (1) перший член описує ефекти інерції маятників, другий член представляє повертаючий крутний момент між взаємодіючими маятниками, а останній – крутний момент сили тяжіння.

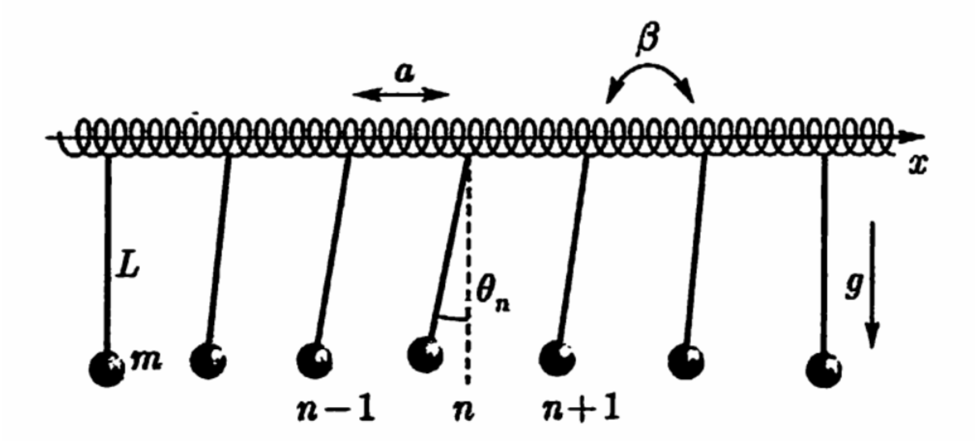

Рис. 1. Ланцюг маятників

Вводячи частоту маятника $\omega_0^2 = \dfrac{mgL}{I}$ і швидкість звуку в ланцюзі $c_0^2 = \dfrac{\beta a^2}{I}$, рівняння (2) зводиться до такого

$$\frac{d^2\theta_n}{dt^2} = \frac{c_0^2}{a^2}\left(\theta_{n+1} + \theta_{n-1} - 2\theta_n\right) - \omega_0^2 \sin\theta_n. \qquad (2)$$

В континуальному наближенні при $\beta \gg mgL$ або $\dfrac{c_0^2}{a^2} \gg \omega_0^2$ рівняння руху (1) зводяться до рівняння синус-Ґордона. Останню умову можна переписати у вигляді $d = \dfrac{c_0}{\omega_0} \gg a$. Тоді параметр d буде характеризувати дискретність ґратки та визначати ширину кінка (рис. 2).

Якщо правий кінець механічного ланцюга здійснює тільки малі відхилення від основного стану $\theta = 0$, то в ланцюзі виникають лише малоамплітудні хвилі. Якщо початкове збурення є повним оборотом першого маятника, то це обертання буде колективно поширюватися по ланцюгу у формі кінка. Після відбиття від протилежного вільного кінця обертання почне поширюватися у протилежний бік у формі антикінка (рис. 2).

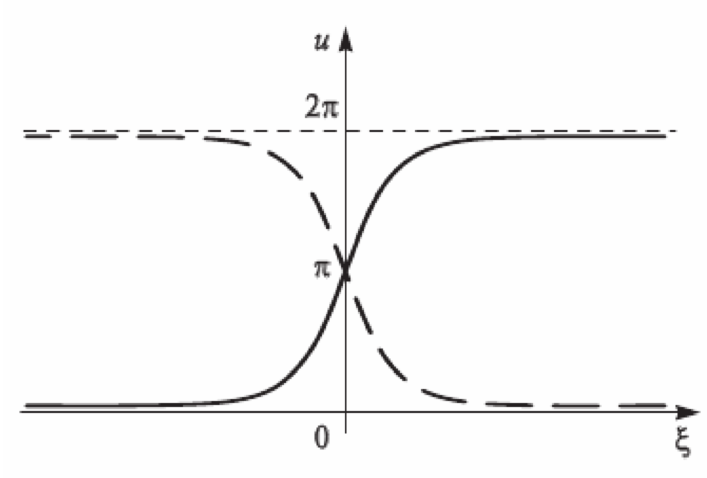

Рис. 2. Солітонні розв’язки рівняння синус-Ґордона (кінк і антикінк)

Оскільки ширина кінка визначається парметром дискретності d, то випадок $d \gg a$ відповідає континуальній моделі, яка описується рівнянням синус-Ґордона. Однак, якщо $d \sim a$, то ефекти дискретності стають важливими і можуть сильно впливати на рух кінка. У випадку $d \ll a$ ширина кінка стає порівнянною з кроком ланцюга і тому кінк сильно закріплюється ефективним потенціалом ґратки. В такому сильно дискретному ланцюзі вже можна спостерігати послідовність кінків та антикінків, оскільки всі вони будуть закріплені на ґратці.

Модель адсорбованих атомів на поверхні кристала

Одне із найважливіших застосувань моделі Френкеля-Конторової знайдено у фізиці поверхні, де ця модель використовується для опису динаміки адсорбованих атомів на поверхні кристала (див., наприклад, [16]). Власне *адсорбований атом* або *адатом* – це і є атом, який знаходиться у верхньому шарі на поверхні кристала (рис. 3). Тут потенціал підложки створюють атоми поверхні кристала, а адсорбовані на цій поверхні атоми описуються як ефективні частинки моделі Френкеля-Конторової. Адатоми зазвичай більш мобільні, ніж атоми підложки, які можуть тільки коливатися біля своїх положень рівноваги. Тому для цих моделей потенціал підложки можна вважати жорстким. У деяких випадках випадках поверхневі атоми створюють борозенчастий потенціал. У цьому випадку адатоми, розміщені в бороздах поверхні, можна розглядати як одновимірний ланцюг.

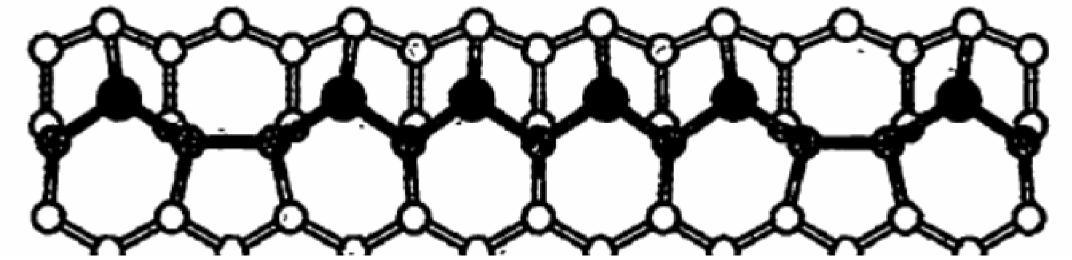

Рис. 3. Адсорбовані атоми на поверхні кристала

У застосуваннях моделі Френкеля-Конторової до фізики поверхні парметр концентрації атомів θ може змінюватися в широкому діапазоні, від значення $\theta = 0$ (одиничний атом) до $\theta = 1$ (моношар атомів) і навіть може набувати більших значень, коли ефективний розмір адатомів менше періода зовнішнього потенціала (наприклад, для атомів літію, адсорбованих на поверхнях перехідних металів). В силу цього модель Френкеля-Конторової дозволяє аналізувати багато фізичних явищ, зокрема, переходи між різними співрозмірними структурами і переходи між співрозмірними і неспіврозмірними структурами. Параметри моделі можуть бути оцінені або навіть обчислені з хорошою точністю. В шарі адатомів безрозмірна стала жорсткості g в моделі Френкеля-Конторової зазвичай має значення $0{,}1 \div 1$. Більше того, адсорбовані системи можуть бути вивченими експериментально прямими методами, такими як скандувальна тунельна мікроскопія, які забезпечують пряму перевірку багатьох теоретичних передбачень.

Крім того, модель Френкеля-Конторової та її узагальнення можуть бути використаними для опису динаміки чистих поверхонь при трактуванні атомів поверхні як атомів ефективної системи Френкеля-Конторової, в той час як атоми поперднього шару створюють ефективний потенціал підложки. Зокрема, модель Френкеля-Конторової можна використати для опису поверхонь реконструкції, структури суміжних поверхонь напівпровідників, процесів росту кристала і ковзання міграційних островків на поверхні кристала.

Одновимірність стандартної моделі Френкеля-Конторової є її серйозним обмеженням. Справді, зазвичай квазіодновимірні ланцюги адатомів не є повністю незалежними один від одного. Вони можуть формувати систему паралельних слабко взаємодіючих ланцюгів. Наприклад, атоми, адсорбовані на ступінчатих або рифлених поверхнях кристала, можуть бути описані як анізотропна двовимірна система слабко зв'язаних ланцюгів. Розгяд кінківпервинних ланцюгів Френкеля-Конторової як квазічастинок на періодичному потенціалі Пайєрсла-Набарро дозволяє описати колективні збурення двовимірної системи як вторинні кінки, які самі по собі можуть бути описані в рамках вторинної моделі Френкеля-Конторової. Система взаємодіючих ланцюгів Френкеля-Конторової була вивчена в працях О. Брауна та Ю.Ківшара.

Моделі джозефсонівських контактів

Серед багатьох систем, які описуються рівнянням синус-Ґордона, одним із найбільш природних прикладів є динаміка вихрів в довгих *джозефсонівських контактах* або *джозефсонівських лініях передачі*. Кінк у цьому випадку часто називають *флаксоном*, оскільки він несе квант магнітного потоку Φ_0, який рухається між двома надпровідними електродами. Є декілька широких оглядів з динаміки вихрів у джозефсонівських контактах (див. [11]). Ця область активно розвивається, особливо після відкриття явища високотемпературної надпровідності.

Флаксон у джозефсонівських контактах несе магнітний потік Φ_0, створений циркулюючим у надпровіднику струмом. Цей круговий струм між двома надпровідними плівками, розділеними шаром діелектрика твощиною в декілька нанометрів. Флаксон відповідає 2π-кінку різниці фаз φ хвильової функції між двома надпровідними електродами контакта. Рівняння синус-

Ґордона з додатковими доданками, які описують динаміку системи в нормалізованій формі, записується у вигляді:

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}-\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\sin\varphi=-\alpha\frac{\partial\varphi}{\partial t}+\beta\frac{\partial^3\varphi}{\partial x^2\partial t}+\gamma. \qquad (3)$$

Тут час t вимірюється в одиницях ω_0^{-1}, де ω_0 – джозефсонівська плазмова частота,а просторова координата x вимірюється в одиницях джозефсонівської глибини проникнення λ_J. Перший дисипативний доданок, пропорційний α, з’являється внаслідок тунелювання квазічастинок, а другий, пропорційний β, з’являється внаслідок поверхневого опору надпровідників. Сталий член γ представляє собою нормалізовану густину підмагнічуючого струму. Для опису поведінки конкретної системи рівняння (3) має розв’язуватися із відповідними граничними умовами, які залежать від геометрії контакта та враховують магнітне поле, накладене в площині контакта.

Загальною властивістю джозефсонівських контактів є достатня малість параметрів α, β, γ. Важливим розв’язком рівняння (3) з нульовою правою частиною є кінк $\varphi = 4tg^{-1}e^{\xi}$, де $\xi = \dfrac{x-vt}{\sqrt{1-v^2}}$. Швидкість v визначається балансом між втратами і діючими силами, що приводить до $v=\dfrac{1}{\sqrt{1+\left(4\alpha/\pi\gamma\right)^2}}$. Флаксон поводить себе подібно до релятивістської частинки. Його швидкість насичується при більших значеннях $\dfrac{\gamma}{\alpha}$ і стає близькою до швидкості c лінійних хвиль в контакті, яка називається *швидкістю Свіхарта*.

Важливе застосування моделі Френкеля-Конторової знайдено в теорії *систем джозефсонівських контактів*, де дискретний ланцюг ефективних частинок з’являється, коли розглядається магнітний потік в дискретних паралельних системах слабких зв’язків між надпровідниками. Сильні ефекти дискретності з’являються у випадку зміщених систем малих джозефсонівських контактів, які також ще називають *сходами джозефсонівських контактів*.

Приклад такої системи схематично зображено на рис. 4. Зокрема, на рис. 4 (а) представлено схематичний вигляд лінійних, а рис. 4 (б) – кільцевих сходів джозефсонівських контактів. Стрілки позначають напрям прикладеного зовнішнього підмагнічуючого струму. Обидві ці схеми були використані для вивчення локалізованих мод – *дискретних бризерів*.

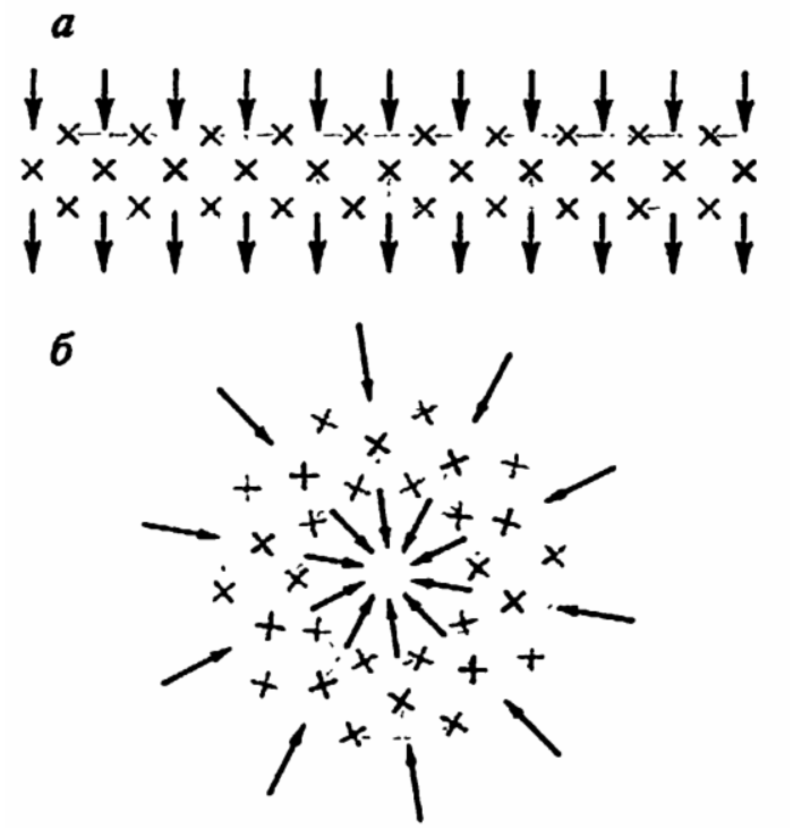

Рис. 4. Схематичний вигляд сходів джозефсонівських контактів

Для опису магнітного потоку в дискретних паралельних масивах слабких зв’язків між надпровідниками використовують модель Френкеля-Конторової такого вигляду:

$$\frac{d^2\varphi_n}{dt^2} = \frac{1}{a^2}\left(\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1} - 2\varphi_n\right) - \sin\varphi_n - \alpha\frac{d\varphi_n}{dt} + \gamma,$$

де $n = \overline{1, N}$. Це рівняння представляє собою рівняння Кірхгофа для електромережі з масиву N елементів джозефсонівських контактів, зв’язаних через паралельні комбінації опір/індуктор. Фази на віртуальних точках $n = 0$ і $n = N + 1$ визначаються через граничні умови. Ця модель була проаналізована теоретично А. Устіновим [11] та еспериментально підтверджена С. Ватанабе та ін. [12].

Нелінійні моделі динаміки ДНК

Моделі типу Френкеля-Конторової відіграють важливу роль в інтерпретації певних біологічних процесів, таких як динаміка і денатурація макромолекули ДНК (див., наприклад, [13]). Структура подвійної спіралі ланцюга ДНК достатньо складна. Однак найбільш загальні властивості макромолекул типу ДНК можуть бути описані гамільтоніаном H, в якому припускається, що всі основи ланцюга ДНК тотожні.

Одна з перших нелінійних моделей, запропонована для дослідження динаміки ДНК, звертала увагу на ротаційні рухи основ ДНК і фактично зводилась до еквівалентної механічної моделі маятників, розглянутої вище. Використовуючи аналогію між ротаційним рухом нитки ДНК і ротаційними рухами маятників, автори праці припустили, що відкритий стан макромолекули ДНК може бути описаний кінковим розв’язком моделі Френкеля-Конторової. Для того, щоб зробити модель більш акуратною, потрібно врахувати ротаційні рухи основ обох ниток ДНК, розглянувши модель, подібну до подвійного стержня [13].

Так звана плоска модель торс іонної динаміки спочатку була створена для того, щоби описати рух кінків, які повинні відігравати центральну роль в транскрипції ДНК. Одна з таких моделей може бути введена для B-конформації молекули ДНК, фрагмент якої представлено на рис. 9. Лінії на рисунку відповідають скелету подвійної спіралі, а чорні і сірі паралелограми відповідають основам в парах (AT і GC). Ця модель враховує ротаційні рухи основ навколо цукрово-фосфатних ланцюгів в площині, перпендикулярній до осі спіралі (стрілки на рисунку вказують додатні напрями обертання для кожного ланцюга). Якщо розглянути плоску модель ДНК, в якій макромолекула формується двома прямими лініями, які знаходяться на відстані h одна від одної, і додатково вважається, що основи можуть тільки обертатися навколо свого ланцюга, залишаючись увесь час перпендикулярними до неї, то положення сусідніх пар різних ланцюгів будуть задаватися тільки кутами обертання.

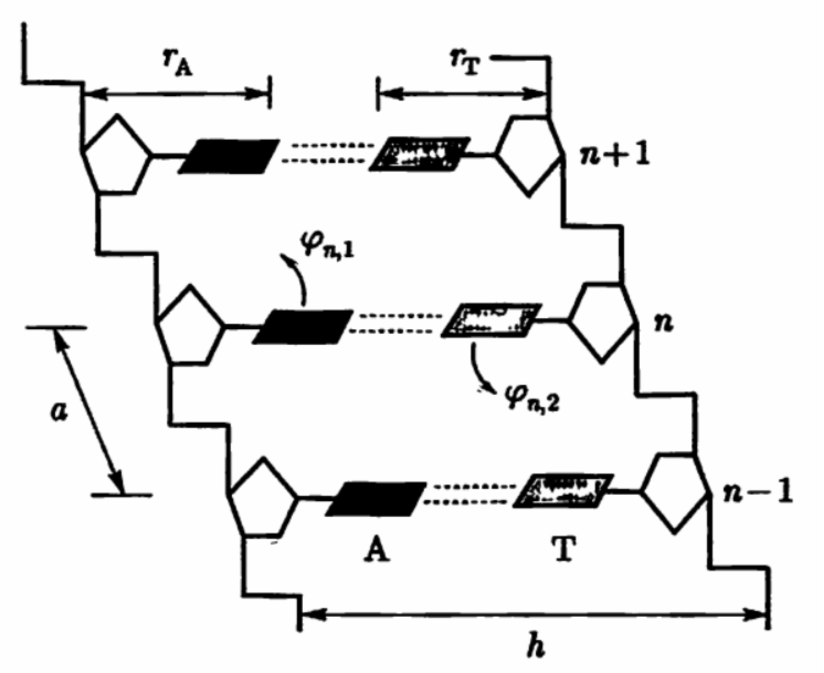

Рис. 9. Фрагмент подвійного ланцюга ДНК

У найпростішому випадку рівняняння ротаційного руху n-ої основи першого ланцюга має вигляд

$$mr^2 \frac{d^2\phi_{n,1}}{dt^2} = gr^2\left(\phi_{n+1,1} + \phi_{n-1,1} - 2\phi_{n,1}\right) - \\ -kr^2\left(2\sin\phi_{n,1} - \sin\left(\phi_{n,1} + \phi_{n,2}\right)\right). \tag{4}$$

Аналогічний вигляд має рівняння руху для другого ланцюга. Тут змінні $\phi_{n,1}$ та $\phi_{n,2}$ відповідають кутовим зміщенням n-го маятника в першому і другому ланцюгах відповідно, g – жорсткість горизонтальної нитки, r і m – довжина і маса маятника, k – параметр, який описує силу взаємодії між ланцюгами.

Модель (4) має принаймні дві групи частинних розв'язків, $\phi_{n,1} = \pm\phi_{n,2}$, для яких динаміка ДНК знову може бути описана гамільтоніаном

$H = \sum_n \left(\frac{1}{2} \dot{y}_n^{(i)} + \frac{g}{2} \left(y_{n+1}^{(i)} - y_n^{(i)} \right)^2 + \left(1 - \cos y_n^{(i)} \right) \right)$, де $y_n^{(i)}$ – узагальнена координата, яка описує основу n i-го ланцюга подвійної спіралі. У загальному випадку модель (4) описує два зв'язані ланцюги Френкеля-Конторової.

Література:

1. Atkinson W., Cabrera N. Motion of a Frenkel–Kontorowa dislocation in a one-dimensional crystal. *Phys. Rev*. 1965. Vol. 138 A. P. 763-794.
2. Aubry S. Breathers in nonlinear lattices: Existence, linear stability and quantization. *Physica D*. 1997. Vol. 103. P. 201–250.
3. Aubry S. Discrete breathers in anharmonic models with acoustic phonons. *Ann. Inst. H. Poincare, Phys. theorique.* 1998. Vol. 68. P. 381-420.
4. Bak S. M. Existence of heteroclinic traveling waves in a system of oscillators on a two-dimensional lattice. *Journal of Mathematical Sciences*. 2016. Vol. 217, № 2 (August). P. 187-197.
5. Bak S. M. Homoclinic traveling waves in discrete sine–Gordon equation with nonlinear interaction on 2D lattice. *Matematychni Studii*. 2019. Vol. 52, № 2. P. 176-184.
6. Bak S. The existence of heteroclinic traveling waves in the discrete sine-Gordon equation with nonlinear interaction on a 2D-lattice. *Journal of mathematical physics, analysis, geometry*. 2018. Vol. 14, № 1. P. 16-26.
7. Braun O. M., Kivshar Y. S. The Frenkel-Kontorova model. Berlin: Springer, 2004. 427 p.
8. Kreiner C.-F., Zimmer J. Heteroclinic travelling waves for the lattice sine-Gordon equation with linear pair interaction. *Discrete and continuous dynamical systems*. 2009. Vol. 25, № 3. P. 1-17.
9. Kreiner C. F., Zimmer J. Travelling wave solutions for the discrete sine–Gordon equation with nonlinear pair interaction. *Nonlinear Analysis: Theory Methods & Applications*. 2009. Vol. 70, № 9. P. 3146–3158.
10. Scott A. C. A Nonlinear Klein-Gordon Equation. *Amer. J. Phys.* 1969. Vol. 37. P. 52-61.
11. Ustinov A. V., Doderer T., Huebener R. P., Pedersen N. F., Mayer B., Oboznov V. A. Dynamics of sine-Gordon solitons in the annual Josephson junction. *Phys. Rev. Lett.* 1992. Vol. 69. P. 1815.
12. Watanabe S., Strogatz S. H., van der Zant H. S. J., Orlando T. P. Dynamics of circular Josephson-junction arrays and the discrete sine-Gordon equation. *Physica D.* 1996. Vol. 97. P. 429-740.
13. Yakushevich L. A. Nonlinear Physics of DNA. Chichester: Wiley, 1998. 218 p.
14. Бак С. М. Дискретні нескінченновимірні гамільтонові системи на двовимірній ґратці : дис. ... докт. фіз.-мат. наук : 01.01.02. Вінниця, 2020. 336 с.
15. Бак С.М. Періодичні біжучі хвилі в дискретному рівнянні sin-Гордона на двовимірній ґратці. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки: зб. наук. праць*. Кам'янець-Подільський: Кам'янець-Подільський національний університет імені Івана Огієнка, 2013. Вип. 9. С. 5-10.
16. Браун О. М., Медведев В. К. Взаимодействие между частицами, адсорбированными на поверхности металлов. *УФН*. 1989. Т. 157, № 4. С. 631-666.
17. Українець Н., Бак С., Ковтонюк Г. Біжучі хвилі в моделі типу Френкеля-Конторової. *Актуальні проблеми математики, фізики, комп'ютерних наук і технологій* : зб. наук. пр. / С. В. Подолянчук (голова) [та ін.] ; Вінницький державний педагогічний університет імені Михайла Коцюбинського [Електронне мережне наукове видання]. Вінниця, 2022. Вип. 19. С. 44-49.