

## Θερμικά σολιτόνια στο πλέγμα Toda

Ν. Θεοδωρακόπουλος και Ν. Χ. Μπακάλης

*Κέντρο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών  
Λ. Βασ. Κωνσταντίνου 48, 116 35 ΑΘΗΝΑ*

### Περίληψη

Το ποσοστό των βαθμών ελευθερίας που είναι κατειλημμένα από μη γραμμικές διεγέρσεις (σολιτόνια) στην κλασσική αλυσίδα Toda υπολογίζεται συναρτήσει της θερμοκρασίας στα πλαίσια του θερμοδυναμικού Bethe Ansatz. Τα αποτελέσματα αποδίδουν πλήρως πρόσφατες αριθμητικές προσομοιώσεις. Η εξάρτηση σε χαμηλές θερμοκρασίες είναι  $T^{1/3}$ .

### Εισαγωγή

Το πλέγμα Toda αποτελεί σημαντικό πρότυπο για την μελέτη θεμελιωδών πτυχών της μη γραμμικότητας. Λόγω της εξισορρόπησης αναρμονικότητας και διασποράς το πλέγμα υποστηρίζει σολιτονιακές διεγέρσεις [1]. Επιπλέον, έχει την ιδιότητα της πλήρους ολοκληρωσιμότητας [2], και συνεπώς η στατιστική μηχανική του περιγράφεται με βάση την εικόνα αλληλεπιδρώντων σολιτονίων και φωνονίων [3-7].

Σημαντικές ιδιότητες μη γραμμικών κυμάτων σε μονοδιάστατα ή ημιμονοδιάστατα υλικά είναι γενικού χαρακτήρα· επομένως, τα συμπεράσματα που εξάγονται στο πλαίσιο του παραδειγματικού προτύπου Toda αναμένεται ότι θα είναι τουλάχιστον χρήσιμα σαν προσεγγίσεις για την συμπεριφορά πραγματικών υλικών. Με το σκεπτικό αυτό οι Muto, Scott και Christiansen[8,9] πραγματοποίησαν μία υπολογιστική προσομοίωση μεγάλης κλίμακας για την δυναμική του πλέγματος Toda. Χρησιμοποιώντας μία ευφυή τεχνική καταμέτρησης, επέτυχαν να προσδιορίσουν το ποσοστό των σολιτονιακών βαθμών ελευθερίας συναρτήσει της θερμοκρασίας.

Το συμπέρασμά τους συνοψίζεται, σε χαμηλές θερμοκρασίες, στο ότι αριθμός των σολιτονίων είναι ανάλογος (i) του ολικού αριθμού των βαθμών ελευθερίας και (ii) της τρίτης ρίζας της απόλυτης θερμοκρασίας. Σύμφωνα με τις εργασίες [8,9], με λογική επιλογή των υλικών παραμέτρων, τα αποτελέσματα της προσομοίωσης θα

μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν στην ερμηνεία φαινομένων μεταφοράς στο DNA.

Η εξάρτηση της πυκνότητας σολιτονίων από την δύναμη  $T^{1/3}$  είχε προβλεφθεί και από παλαιότερες προσεγγιστικές θεωρίες. Αρχικά παρήχθη στα πλαίσια της θεωρίας του ιδανικού αερίου σολιτονίων [10], πλὴν ὅμως εσφαλμένα [11] (στην πραγματικότητα η προσέγγιση αυτή δίνει πυκνότητα σολιτονίων ανάλογη του  $T$  σε χαμηλές θερμοκρασίες [12]). Το  $T^{1/3}$  ξαναεμφανίστηκε αργότερα σαν αποτέλεσμα λιγότερο απλοϊκών θεωριών που ελάμβαναν υπόψη την αλληλεπίδραση ενός σολιτονίου με το θερμικό αέριο φωνονίων [13,14]. Οι προβλεπόμενοι όμως συντελεστές αναλογίας διαφωνούν με τα αποτελέσματα της προσομοίωσης και, το σημαντικότερο, αυτές οι θεωρίες ενός σολιτονίου είναι γνωστό ότι δεν προβλέπουν σωστά άλλες θερμοδυναμικές ιδιότητες, π.χ. την ειδική θερμότητα, ή τον συντελεστή θερμικής διαστολής. Επομένως, και αυτή η συμφωνία θα μπορούσε να είναι συμπτωματική.

Σκοπός της εργασίας αυτής είναι να παρουσιάσει έναν *ακριβή* υπολογισμό της πυκνότητας σολιτονίων, βασιζόμενο στο θεωρητικό πλαίσιο του αναπτύγματος Bethe (BA) το οποίο επιτυγχάνει την πλήρη περιγραφή της θερμοδυναμικής του πλέγματος Toda [3-7]. Τα αποτελέσματά μας ευρίσκονται σε πλήρη συμφωνία με την υπολογιστική προσομοίωση. Ελπίζουμε ότι αυτό θα αποβεί χρήσιμο για την πληρέστερη κατανόηση του υπάρχοντος θεωρητικού πλαισίου, μιά και επιτυγχάνεται η σύνδεση της μικροσκοπικής δυναμικής που προκύπτει από το ανάπτυγμα Bethe με την φυσική του σολιτονικού μετρητή [8,9], που βασίζεται στο ότι το σολιτόνιο είναι μιά εντοπισμένη διέγερση.

## Ορισμοί, Συμβολισμοί

Κατωτέρω αναφέρονται συνοπτικά οι απαραίτητες γιά την παρούσα εργασία θεωρητικές έννοιες. Λεπτομέρειες αναφέρονται στα πρωτότυπα [1-7]. Η χαμιλτονιανή

$$H = \sum_{i=1}^N \left( \frac{p_i^2}{2m} + \frac{a}{b} e^{-b(y_{i+1} - y_i)} + a(y_{i+1} - y_i) \right) \quad (1)$$

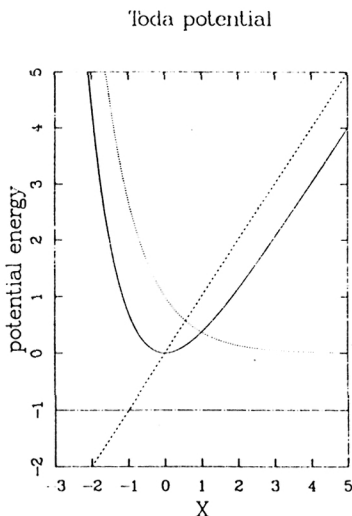
περιγράφει αλυσίδα  $N$  ατόμων ίσων μαζών  $m$  στις θέσεις  $y_i$  και με οριζίες  $p_i$ . Η δυναμική ενέργεια (Σχ. 1) αποτελείται από μιά εκθετικά απωστική αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων, βεληνικούς  $1/b$ , και από ένα γραμμικό ελκτικό όρο που ισοδυναμεί με εξωτερική δύναμη  $a$ , η οποία συγκρατεί τα άτομα στο πλέγμα.

Η δυναμική των σωματιών στο άπειρο πλέγμα Toda είναι πλήρως ολοκληρώσιμη και διαχωρίσιμη. Λόγω της τελευταίας ιδιότητας ο αντίστροφος

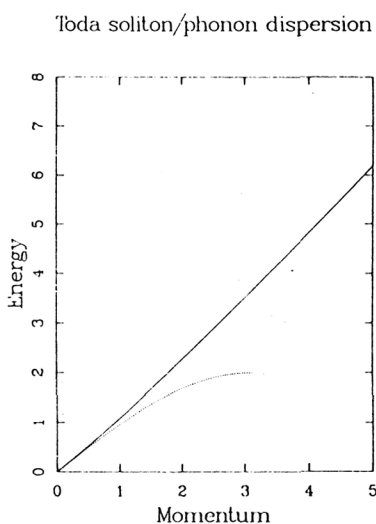
φασματικός μετασχηματισμός (inverse spectral transform (IST)) αποκαλύπτει δύο διακριτούς τύπους δυναμικής συμπεριφοράς, σύμφωνα με την θέση των ιδιοτιμών στο φάσμα του τελεστή που σχετίζεται με το συγκεκριμένο μή γραμμικό πρόβλημα [2]: (α) εκτεταμένες, υποηχητικές διεγέρσεις που εμφανίζουν διασπορά (φωνονοειδείς), οι οποίες αντιστοιχούν στο συνεχές, και (β) εντοπισμένες, υπερηχητικές διεγέρσεις που δεν εμφανίζουν διασπορά (σολιτονοειδείς), οι οποίες αντιστοιχούν στο διάκριτο τμήμα του φάσματος του ανωτέρω γραμμικού τελεστή. Η σχέση ενέργειας/ορμής [3,11,12] απεικονίζεται στο Σχ. 2.

Η σκέδαση οποιουδήποτε πλήθους διεγέρσεων είναι μια πλήρως ελαστική διεργασία και μπορεί να περιγραφεί από κατά ζεύγη προσθετικές μετατοπίσεις φάσεως [1,2].

Η στατιστική μηχανική ισορροπίας μπορεί να περιγραφεί πλήρως είτε βάσει των σολιτονίων, των φωνονίων και των αλληλεπιδράσεών των, είτε, ισοδύναμα στα πλαίσια της θεωρίας ΒΑ [3-7]. Οι θερμοδυναμικές ιδιότητες μπορούν να εκφραστούν με την βοήθεια της κατανομής των ορμών στον αντίστροφο χώρο. Οι πυκνότητες των κατειλημμένων και των μη κατειλημμένων καταστάσεων συμβολίζονται με  $\rho(k)$  και  $\rho_h(k)$  αντιστοίχως. Και ο λόγος  $\rho(k) / \rho_h(k) = \exp(-\beta e(k))$  ορίζει την ημιενέργεια μιάς διεγέρσεως.



Σχ.1. Το δυναμικό του πλέγματος Toda (συνεχής γραμμή). Η εστιαγμένη γραμμή και η ευθεία παριστάνουν αντιστοίχως το απωστικό και το ελκτικό μέρος της αλληλεπιδράσεως.



Σχ.2. Οι σχέσεις διασποράς των σολιτονίων (επάνω καμπύλη) και των φωνονίων (κάτω καμπύλη).

## Τί είναι θερμικό σολιτόνιο;

Γιά  $T=0$  και στο κλασσικό όριο,  $\hbar \rightarrow 0$ , η συνάρτηση  $\rho(k)$  έχει ένα ανώμαλο σημείο. Οι καταστάσεις των σωματιών είναι κατελιημμένες μέχρι το  $k_F = 2 (\pi a / b)^{1/2} / \hbar$  · αποδεικνύεται ότι οι διεγέρσεις ενός σωματίου αντιστοιχούν ακριβώς σε σολιτόνια ή φωνόνια ανάλογα με το αν συμπεριφέρονται σαν σωματίια ή σαν οπές· οι αντίστοιχες σχέσεις διασποράς [3] και άλλες δυναμικές ιδιότητες [4-7] υπολογιζόμενες στα πλαίσια των ανεξαρτήτων θεωριών BA και IST ταυτίζονται.

Για  $T \neq 0$  δεν υπάρχει άμεση ερμηνεία των ημιενεργειών BA. Δεν υπάρχει ανώμαλο σημείο ούτε στην  $\rho(k)$  ούτε στην  $\varepsilon(k)$ . Αλεναντίας έχει δειχθεί [16] ότι στον χώρο των αρχικών κβαντικών αριθμών του BA, η θάλασσα Fermi κυριολεκτικά “εξατιμίζεται” όταν το (κλασσικό) σύστημα θερμομανθή. Έχει όμως επίσης αποδειχθεί ότι το κλασσικό όριο της περιγραφής BA ισοδυναμεί ακριβώς με την εικόνα των αλληλεπιδρώντων σολιτονίων και φωνονίων [5-7] κατά την οποία τα σολιτόνια και τα φωνόνια διατηρούν τις ιδιοτητές τους όπως ορίστηκαν για  $T=0$ . Αυτή η ισοδυναμία δεν θα υπήρχε χωρίς τον συγκεκριμένο ορισμό του  $k_F$  που είναι ανεξάρτητος της θερμοκρασίας.

Φαίνεται, άρα, ότι μια κυριολεκτική ερμηνεία του BA υποδεικνύει πράγματι μια μοναδική διαδικασία μετρήσεως σολιτονίων. Μένει να δειχθεί αν αυτή η διαδικασία είναι συμβατή με αυτήν που ακολουθείται κατά την απ’ ευθείας μέτρηση των σολιτονίων [8,9].

## Αποτελέσματα

Γιά μιá αλυσίδα  $N$  ατόμων και μήκους  $L$ , η πυκνότητα των κατελιημμένων καταστάσεων ικανοποιεί στο θερμοδυναμικό όριο την σχέση

$$\frac{N}{L} = d = \int_{-\infty}^{\infty} dk \rho(k). \quad (2)$$

Ορίζουμε τον αριθμό σολιτονίων  $N_s$  μέσω της σχέσεως

$$\frac{N_s}{L} = \int_{|k| > k_F} dk \rho(k). \quad (3)$$

Γιά να προσδιορίσουμε το ποσοστό των σολιτονίων  $N_s / N$  χρησιμοποιούμε ακόμη (i) την σχέση [18]

$$\rho_h(k) = -\frac{1}{2\pi} d \left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial p} \right)_T, \quad (4)$$

η οποία ισχύει στο κλασσικό όριο, και (ii) την αναλυτική λύση [6] της ολοκληρωτικής εξίσωσης [4] που προσδιορίζει την ημιενέργεια  $\varepsilon(k)$  υπό δεδομένη εξωτερική πίεση  $P$ , δηλ.

$$e^{-\beta \varepsilon(k; \beta, p)} = 2\pi g \beta^{3/2} \phi\left(\frac{2\sqrt{\beta}k}{k_F}, \beta(1+p)\right), \quad (5)$$

όπου  $g = h \omega_0 / k_B T_0$ ,  $\omega_0 = (ab/m)^{1/2}$ ,  $T_0 = (a/b) / k_B$ ,  $\beta = T_0 / T$ ,  $p = P/a$ , και

$$\phi(t, \lambda) = \frac{1}{\pi} \frac{\partial}{\partial t} \theta(t, \lambda) \quad (6)$$

$$\theta = \arg f_+(t, \lambda) \quad (7)$$

$$f_+(t, \lambda) = f_1 + i f_2 = \int_0^\infty du e^{-it u - u^2/2} u^{\lambda-1}, \quad (8)$$

η οποία λύνει την εξίσωση

$$\frac{d^2 f_+}{dt^2} + t \frac{df_+}{dt} + \lambda f_+ = 0, \quad (9)$$

(παράβολική κυλινδρική συνάρτηση). Από τις εξισώσεις (2)-(7) αποδεικνύεται ευθέως ότι

$$n_s = 2 \int_{2\sqrt{\beta}}^\infty dt \left( \frac{\partial \phi(t, \lambda)}{\partial \lambda} \right)_{\lambda=\beta(1+p)} = 1 - \frac{2}{\pi} \left( \frac{\partial \theta(2\sqrt{\beta}, \lambda)}{\partial \lambda} \right)_{\lambda=\beta(1+p)}. \quad (10)$$

Η έκφραση (10) αντιπροσωπεύει τις προβλέψεις της ακριβούς στατιστικής μηχανικής (BA) για το ποσοστό των βαθμών ελευθερίας που καταλαμβάνονται από σολιτόνια. Όμως ο κατ'ευθείαν υπολογισμός του  $f_+$  δεν είναι πρακτικός λόγω του έντονου ταλαντωτικού του χαρακτήρα για μεγάλες τιμές του  $\lambda$  (δηλ. χαμηλές θερμοκρασίες). Ο απλούστερος τρόπος υπολογισμού χρήσιμων αριθμών από την θεωρία είναι να λύσουμε κατ' ευθείαν την μη γραμμική εξίσωση του Riccati [6] η οποία έχει πολύ πιο ομαλή συμπεριφορά και ενδείκνυται για αριθμητικές ολοκληρώσεις.

Αν  $f_+ = F e^{i\theta}$  και  $w = F' / F$ , τότε η (9) συνεπάγεται

$$\frac{d\theta}{dt} = \psi \quad (11)$$

$$\frac{d\psi}{dt} = -(t + 2w)\psi \quad (12)$$

$$\frac{dw}{dt} = -w(w + t) + \psi^2 - \lambda, \quad (13)$$

με αρχικές συνθήκες

$$\theta(0) = 0 \quad (14)$$

$$\psi(0) = f_2'(0)/f_1(0) = \sqrt{2} \frac{\Gamma(\frac{\lambda+1}{2})}{\Gamma(\frac{\lambda}{2})} \quad (15)$$

$$w(0) = 0. \quad (16)$$

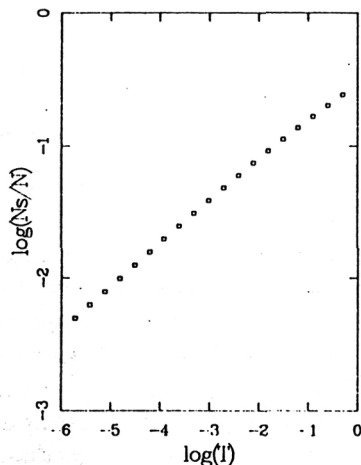
Το πρόβλημα αρχικών τιμών που ορίζεται από τις εξισώσεις (11)-(16) μπορεί να λυθεί αριθμητικά με μεγάλη ακρίβεια με τη μέθοδο των Bulirsch-Stoer [19]. Για δεδομένο  $\beta$  ολοκληρώνουμε από  $t=0$  έως  $t = 2 \beta^{1/2}$  για δύο παραπλήσιες τιμές του  $\lambda = \beta(1 \pm \delta)$  με  $\delta = 10^{-4}$  και υπολογίζουμε τα αντίστοιχα  $\theta$ . Η διαφορά των τιμών του  $\theta$  πολλαπλασιασμένη επί  $2/\pi$  είναι η αριθμητική εκτίμηση του ποσοστού των βαθμών ελευθερίας που καταλαμβάνονται από φωνόνια. Ότι απομένει καλύπτεται από σολιτόνια (εξ.10). Τα αποτελέσματα απεικονίζονται σε διπλή λογαριθμική κλίμακα στο Σχ.3 και υπονοούν μία εξάρτηση  $T^{1/3}$  στο όριο  $T \rightarrow 0$ . Μία ανάλυση των αποτελεσμάτων βάσει αυτής της εξάρτησης (Σχ. 4) δίνει την τιμή του συντελεστή  $A$  στην ασυμπτωτική έκφραση

$$n_s = AT^{1/3} + O(T^{2/3}). \quad (17)$$

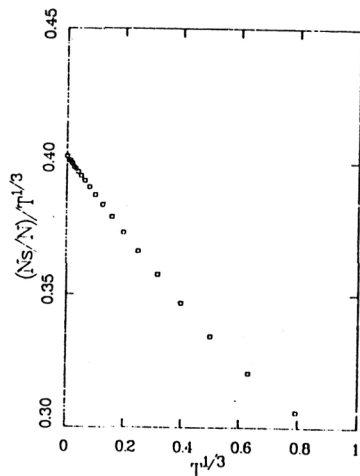
Χρησιμοποιώντας την κατά Richardson παρέκταση [19] οδηγούμεθα στην τιμή  $A=0.402$ , σε εξαιρετική συμφωνία με την τιμή  $A=0.397$  που εξάγεται από την αριθμητική προσομοίωση [8,9] (με  $T_0 = 601$  K).

## Σχόλια

Παρουσιάσαμε ένα θεωρητικό υπολογισμό της πυκνότητας θερμικών σολιτόνιων στο πλέγμα Toda βάσει της θερμοδυναμικής του ΒΑ στο κλασσικό όριο. Η βασική υπόθεση του υπολογισμού μας, που τον σχετίζει με την φυσική του σολιτονικού μετρητή [8,9], είναι ότι ταυτίζουμε τον αριθμό των σολιτονίων με τον αριθμό των κατειλημμένων καταστάσεων με ορμή μεγαλύτερη από  $k_F$ . Αυτό κατ' αρχήν ίσως να φαίνεται αυθαίρετο. Όμως, λόγω της ακριβούς ισοδυναμίας της εικόνας αλληλεπιδρώντων σολιτονίων/ φωνονίων με το ΒΑ - η οποία απαιτεί αυτόν τον ορισμό - γνωρίζουμε ότι μόνο έτσι μπορούν να αναπαραχθούν σωστά οι ιδιότητες της στατιστικής μηχανικής ισορροπίας. Από την άλλη πλευρά, ο μετρητής σολιτονίων, επιλέγοντας ιδιοτιμές μεγαλύτερες της μονάδας, ελέγχει στην πραγματικότητα τον βαθμό εντοπισμού καθεμίας διεγέρσεως παρουσία όλων των



Σχ. 3. Το ποσοστό των βαθμών ελευθερίας  $n_s$  που καταλαμβάνονται από σολιτόνια συναρτήσει της θερμοκρασίας, σε λογαριθμικές κλίμακες.



Σχ. 4. Ο λόγος  $n_s / T^{1/3}$ . Οι τιμές παρεκτείνονται, για  $T \rightarrow 0$ , στο όριο 0.402.

άλλων. Η συμφωνία μεταξύ των δύο διαδικασιών μετρήσεως αποτελεί σαφή ένδειξη της ισοδυναμίας τους.

### Βιβλιογραφία

1. M. Toda, *Theory of Nonlinear Lattices*, Springer, Berlin (1981) και περιεχόμενες αναφορές
2. H. Flashka, *Phys. Rev.* **B9**, 1924 (1974)
3. B. Sutherland, *Rocky Mount. J. Math.* **8**, 413 (1978)
4. N. Theodorakopoulos, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 874 (1984)
5. N. Theodorakopoulos, στο βιβλίο *Dynamical Problems in Soliton Physics*, S. Takeno (ed.), Springer, Berlin, 1985, p.115
6. M. Oppen, *Phys. Lett.* **A 112**, 201 (1985)
7. H. Takayama και M. Ishikawa, *Prog. Theor. Phys.* **76**, 820 (1986)
8. V. Muto, A.C. Scott και P.L. Christiansen, *Phys. Lett.* **A 136**, 33, (1989)
9. V. Muto, A.C. Scott και P.L. Christiansen, *Physica* **D 44**, 75, (1990)
10. T. Schneider και E. Stoll, *αδημοσίευτη εργασία*, (1980)
11. H. Bolterauer και M. Oppen, *Z. Phys.* **B42**, 155 (1981)
12. F.G. Mertens και H. Buttner, *Phys. Lett.* **A84**, 335 (1981)
13. N. Theodorakopoulos στο βιβλίο *Statics and Dynamics of Nonlinear Systems*, H. Bilz *et al.* (ed.), Springer, Berlin, (1983), p. 271
14. F. Yoshida και T. Sakuma, *Phys. Rev.* **A25**, 2750 (1982)
15. P. Gruner-Bauer και F.G. Mertens, *Z. Phys.* **70**, 435 (1988)
16. M. Fowler και N.-C. Yu, *J. Phys.* **A22**, 3095 (1989)
17. N. Theodorakopoulos, στα *Proc. 2nd Int. Conf. on Phonon Physics*, J. Kollar *et al.* (ed.), World Scientific, Singapore, 1985, p.468
18. C.N. Yang και C.P. Yang, *J. Math. Phys.* **10**, 1115 (1969)
19. W. H. Press *et al.*, *Numerical Recipes*, Cambridge (1986)