

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
Федеральное государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Г. М. Чечин, К. Г. Жуков

МЕТОДИЧЕСКОЕ ПОСОБИЕ

**Теоретико-групповые методы в нелинейной динамике
систем с дискретной симметрией**

Часть I

Нормальные моды и их симметрия

Ростов-на-Дону

2007

Методическое пособие разработано кандидатом физико-математических наук, доцентом кафедры теоретической и вычислительной физики Г. М. Чечиным и аспирантом НИИ физики К. Г. Жуковым.

Ответственный редактор

д. ф.-м. н., проф. В. П. Саченко

Компьютерный набор и верстка

аспиранта К. Г. Жукова

Содержание

1	Введение	4
2	Понятие о нормальных модах	4
3	Группы симметрии	19
3.1	Простейшие примеры групп симметрии	19
3.2	Подгруппы групп симметрии	29
4	Симметрия нормальных мод	32
4.1	Симметрия равновесной конфигурации моноатомной цепочки	32
4.2	Симметрия динамических уравнений моноатомной цепочки	35
4.3	Симметрия нормальных мод для моноатомной цепочки	37
5	Учет нелинейности межатомных взаимодействий	39

1 ВВЕДЕНИЕ

Теоретико-групповые методы играют исключительно важную роль во многих разделах современной физики – от физики кристаллов до физики элементарных частиц (см., например, книги [1-4] по теории групп для физиков). По своей сути теория групп является обобщенной теорией симметрии.

Настоящая серия методических пособий посвящена применению теоретико-групповых методов для исследования нелинейной динамики *систем с дискретной симметрией*, основы которой были заложены в работах [5-7] ростовской исследовательской группы в начале 90-х годов прошлого века. В рамках развития этого научного направления было введено фундаментальное понятие *бушей мод*, которое в настоящее время получило международное признание.

В данном пособии сделана попытка изложения теории бушей мод, начиная с “нулевого уровня”, поскольку оно рассчитано на студентов, приступающих впервые к изучению нелинейной динамики систем с дискретной симметрией.

2 ПОНЯТИЕ О НОРМАЛЬНЫХ МОДАХ

Понятие о нормальных модах имеет ключевое значение для дальнейшего изложения, поэтому представляется целесообразным напомнить здесь определение нормальных мод и способ их построения, используя для этого некоторый набор простых примеров.

Начнем с описания нелинейной *моноатомной цепочки* из $N = 4$ атомов. Будем рассматривать только *продольные* колебания, поэтому каждый атом в нашей модели имеет *одну степень свободы*: смещение x_i из его положения равновесия вдоль цепочки (i – номер атома). Ограничимся учетом взаимодействия *ближайших соседей*, причем силу этого взаимодействия будем считать зависящей только от *изменения* расстояния $(x_{i+1} - x_i)$ между соседними

атомами в процессе их колебаний. Такие цепочки называются цепочками типа Ферми-Пасты-Улама (ФПУ).

Рассматриваемая нами модель ФПУ эквивалентна механической системе, которая представляет собой цепочку одинаковых грузиков на одинаковых нелинейных пружинках, изображенную на рисунке 1.



Рисунок 1 – Механическая модель моноатомной цепочки

Введенные нами относительные смещения $(x_{i+1} - x_i)$ определяют величину деформации пружинки между грузиками с номерами i и $i+1$ *.

Первым шагом исследования динамической системы является определение ее уравнений движения. Для этого надо найти все силы, действующие на грузики в цепочке. Как было сказано ранее, на каждый грузик (атом) действуют только силы со стороны его ближайших соседей. На рисунке 1 цепочка изображена в состоянии, в котором все пружинки *растянуты* (величины атомных смещений возрастают от первого атома к четвертому). Тогда, полагая положительным направление слева направо, видим, что растянутая пружинка справа от данного атома “тянет” его в положительном направлении, а растянутая пружинка слева, наоборот, – в отрицательном, как изображено на рисунке 2. Тогда результирующая сила будет равна $F = F_{\text{прав}} - F_{\text{лев}}$, где $F_{\text{прав}}$ – сила, действующая со стороны правого соседа, а $F_{\text{лев}}$ – левого.

* При $x_{i+1} - x_i > 0$ пружинка растянута, а при $x_{i+1} - x_i < 0$ – сжата.



Рисунок 2 – Силы, действующие на атом в цепочке

В рассматриваемой нами модели силы $F_{лев}$ и $F_{прав}$, действующие на i -й атом, зависят от деформации Δx соответствующей пружинки (для $F_{лев}$ $\Delta x = x_i - x_{i-1}$, а для $F_{прав}$ $\Delta x = x_{i+1} - x_i$), и могут быть записаны, вообще говоря, в виде разложения в ряд Тейлора $F(\Delta x) = k\Delta x + \alpha(\Delta x)^2 + \beta(\Delta x)^3 + \dots$. Для начала рассмотрим самый простой случай соответствующий закону Гука: $F(\Delta x) = k\Delta x$. По понятным причинам, такую силу обычно называют *линейной*. Чаще всего мы сталкиваемся с таким случаем при рассмотрении *гармонического* приближения в теории нелинейных колебаний, которое сводится к пренебрежению всеми нелинейными (ангармоническими) членами в разложении сил в соответствующий степенной ряд, в силу предположения о *малости* амплитуд колебаний всех частиц системы.

Запишем уравнение движения, например, для второго атома:

$$m\ddot{x}_2 = F(x_3 - x_2) - F(x_2 - x_1) = k(x_3 - x_2) - k(x_2 - x_1),$$

или, окончательно,

$$m\ddot{x}_2 = k(x_1 - 2x_2 + x_3). \quad (1)$$

Направления сил, приведенные на рисунке 2 для произвольного атома, соответствуют состоянию цепочки, при котором все пружинки *растянуты*. Однако, вид уравнений движения не может зависеть от состояния системы. Поэтому с учетом знаков всех сил и всех смещений, полученное для данного случая уравнение (1) остается справедливым и во всех других случаях, в которых пружинки могут быть растянуты или сжаты произвольным образом.

Задание. Получите уравнение (1), исходя из предположения, что обе, соответствующие грузу с номером 2, пружинки сжаты и исходя из предположения, что одна пружинка сжата, а другая – растянута.

Уравнение (1) можно упростить, выбрав такие единицы измерения, чтобы выполнялось соотношение $k/m=1$. При этом коэффициенты k и m можно опустить, т. е. без ограничения общности положить $k=1$, $m=1$.

Задание. Сделайте переход к таким единицам измерения времени, при которых справедливо соотношение $k/m=1$. Для этого выполните замену переменных вида $t=\gamma\tau$, в которой величина γ определяется из условия приведения уравнения (0) к виду $\ddot{x}_2 = x_1 - 2x_2 + x_3$.

Уравнения движения для всех остальных грузов (атомов) записываются аналогично уравнению (1):

$$\ddot{x}_i = x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1}, \quad i=1..N. \quad (2)$$

Для однозначности решения задачи (2) необходимо, чтобы число переменных $[x_i(t), i=1..N]$ совпадало с числом (N) уравнений. Но в уравнениях (2) при $i=1$ и $i=N$ появляются смещения “несуществующих” атомов с номерами 0 и $N+1$, соответственно. В связи с этим, необходимо *доопределить* некоторым образом смещения этих несуществующих атомов. Обычно это делается с помощью задания некоторых *граничных условий*. Они бывают различных типов. Иногда, по аналогии с натянутой струной, рассматривают цепочки с закрепленными концами, т.е. полагают $x_0(t) \equiv 0$ и $x_{N+1}(t) \equiv 0$. В других случаях могут изучаться цепочки со свободными концами. При этом полагается, что на крайние атомы действует только одна пружинка. Тогда первое и последнее

уравнение системы (2) принимают вид $\ddot{x}_1 = x_2 - x_1$ и $\ddot{x}_N = x_{N-1} - x_N$, соответственно.

Мы же далее будем рассматривать лишь *периодические* граничные условия. При их наложении полагают, что атом, “предшествующий” в рассматриваемой цепочке первому атому, совершает колебания, в точности повторяющие колебания последнего атома [$x_0(t) \equiv x_N(t)$], а атом, “следующий” за последним, повторяет в любой момент времени колебания первого [$x_{N+1}(t) \equiv x_1(t)$]. Иными словами, цепочку считают как бы замкнутой в кольцо, как показано на рисунке 3. Несмотря на очевидную искусственность таких граничных условий, они широко применяются в физике твердого тела и позволяют получить ряд важных результатов.

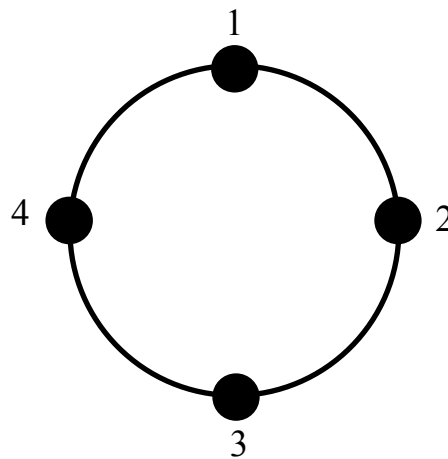


Рисунок 3 – Цепочка, “замкнутая в кольцо” наложением периодических граничных условий

Запишем *линейные* уравнения движения (2) для рассматриваемой нами цепочки из $N = 4$ атомов с учетом периодических граничных условий:

$$\begin{aligned}\ddot{x}_1 &= x_4 - 2x_1 + x_2, \\ \ddot{x}_2 &= x_1 - 2x_2 + x_3, \\ \ddot{x}_3 &= x_2 - 2x_3 + x_4, \\ \ddot{x}_4 &= x_3 - 2x_4 + x_1.\end{aligned}\tag{3}$$

Таким образом, мы имеем систему четырех линейно связанных осцилляторов.

Но как решать полученные дифференциальные уравнения? Согласно основному рецепту эвристики [8], если не удастся решить поставленную задачу, надо проанализировать различные ее *частные случаи*, которые могут оказаться более “податливыми” к решению. Поэтому рассмотрим систему не из четырех частиц, а из одной, т.е. в системе (3) положим $x_2 \equiv x_3 \equiv x_4 \equiv 0$ (закрепим все грузики, кроме первого). Тогда из системы (3) остается только одно уравнение, имеющее вид $\ddot{x}_1 + 2x_1 = 0$. Но это есть хорошо известное уравнение гармонического осциллятора. В более удобной для нас комплексной форме его частное решение можно искать в виде $x_1(t) = Ae^{i\omega t}$, где A – амплитуда, а ω – частота колебаний. Действительно, легко видеть, что после подстановки этого выражения для $x_1(t)$ в наше уравнение гармонического осциллятора получим уравнение $-\omega^2 Ae^{i\omega t} + 2Ae^{i\omega t} = 0$, в котором сокращаются зависящая от времени экспонента и амплитуда, что приводит к *алгебраическому* уравнению для частоты осциллятора: $\omega^2 = 2$. Поскольку с физической точки зрения частота является положительной величиной, находим $\omega = \sqrt{2}$. (Величина A определяется из начальных условий).

Таким образом, нахождение частного решения нашего дифференциального уравнения фактически свелось к решению некоторого алгебраического уравнения с постоянными коэффициентами за счет сокращения временного множителя. Вернемся теперь к (3) и попробуем сделать что-либо аналогичное и для этой системы из нескольких уравнений.

Из структуры уравнений (3) можно видеть, что если *все* функции $x_i(t)$ пропорциональны одной и той же экспоненциальной функции времени вида $e^{i\omega t}$,

то (как и в случае одной частицы) на эту экспоненту можно сократить. Действительно, подстановка вида

$$x_1 = A_1 e^{i\omega t}, x_2 = A_2 e^{i\omega t}, x_3 = A_3 e^{i\omega t}, x_4 = A_4 e^{i\omega t}, \quad (4)$$

где A_1, A_2, A_3, A_4 – некоторые неизвестные нам пока постоянные величины, в систему дифференциальных уравнений (3) приводит к системе линейных алгебраических уравнений относительно амплитуд A_i :

$$\begin{aligned} -\omega^2 A_1 &= A_4 - 2A_1 + A_2, \\ -\omega^2 A_2 &= A_1 - 2A_2 + A_3, \\ -\omega^2 A_3 &= A_2 - 2A_3 + A_4, \\ -\omega^2 A_4 &= A_3 - 2A_4 + A_1. \end{aligned} \quad (5)$$

В матричной форме эта система имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 2-\omega^2 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 2-\omega^2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2-\omega^2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2-\omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Следует заметить, что, будучи *однородной*, система (6) имеет ненулевое решение только в случае, когда ее определитель равен нулю. Приравняв нулю определитель матрицы из системы (6), получим уравнение четвертой степени относительно ω^2 , называемое *характеристическим уравнением*. Понятно, что это уравнение приводит к некоторым ограничениям на возможные значения частот ω . Найдя их, мы можем далее для каждого значения $\omega = \omega_j$ решить задачу о нахождении соответствующих им амплитуд A_i ($i = 1..N$).

Проведение указанных вычислений для цепочки из четырех атомов довольно громоздко, поэтому для прозрачности изложения рассмотрим более простой случай – цепочку из двух атомов с периодическими граничными условиями, уравнения движения для которой имеют вид:

$$\begin{aligned}\ddot{x}_1 &= -2x_1 + 2x_2, \\ \ddot{x}_2 &= 2x_1 - 2x_2.\end{aligned}\tag{7}$$

Для такой цепочки вместо уравнений (6) получим следующие уравнения

$$\begin{pmatrix} 2 - \omega^2 & -2 \\ -2 & 2 - \omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.\tag{8}$$

Приравнявая нулю определитель матрицы системы (8), приходим к характеристическому уравнению второго порядка относительно ω^2 :

$$\omega^4 - 4\omega^2 = 0.\tag{9}$$

Это уравнение при условии $\omega \geq 0$ имеет два корня: $\omega = 0$ и $\omega = 2$.

Подстановка $\omega = 0$ в уравнения (8) приводит к решению вида $A_1 = A_2$, т.е. обе частицы “колеблются” с одинаковой амплитудой и фазой, а стало быть, система движется как единое целое. Такой процесс не является колебательным (Нулевая частота “колебаний” отвечает отсутствию возвращающей силы, действующей на цепочку как целое).

При подстановке в уравнение (8) $\omega = 2$ получаем решение $A_1 = -A_2$, т.е. обе частицы колеблются с одинаковой амплитудой, но противоположной фазой.

Заметим, что рассматриваемая нами сейчас задача (8) сводится к стандартной задаче на нахождение собственных значений и собственных векторов матриц, которая обычно записывается в виде $M\vec{\varphi} = \lambda\vec{\varphi}$, где M – некоторая матрица, λ и $\vec{\varphi}$ – соответственно ее собственное значение и собственный вектор.

В нашем случае в роли собственного значения λ выступает величина ω^2 , в роли собственного вектора – двумерный вектор $\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}$, а матрицей M является матрица

размера 2×2 вида $\begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 2 \end{pmatrix}$ [см. (8)].

В результате вышеприведенных вычислений мы нашли два собственных вектора этой матрицы:

$$\vec{\varphi}_1 = \begin{pmatrix} A \\ A \end{pmatrix} \text{ и } \vec{\varphi}_2 = \begin{pmatrix} A \\ -A \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Здесь постоянная величина A является произвольной, в силу чего собственный вектор можно нормировать на требуемое значение, в частности, его длину всегда можно сделать равной единице. В дальнейшем нам, однако, будет удобно просто положить $A=1$ и, таким образом, представить собственные векторы нашей двумерной матрицы в виде

$$\vec{\varphi}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ и } \vec{\varphi}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Вернемся к рассмотрению цепочки из четырех атомов. Путь решения *стандартной* задачи на собственные векторы и собственные значения матриц хорошо известен (см., например, [9, 10]), хотя обычно он приводит к весьма громоздким математическим выкладкам. В таких случаях уместно использовать компьютер и обратиться к стандартным вычислительным средствам, например, к системе MAPLE. В результате для случая цепочки из 4-х атомов мы должны получить следующее решение:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0, \quad \lambda_2 = \lambda_3 = 2, \quad \lambda_4 = 4, \\ \vec{\varphi}_1 &= \{1, \quad 1, \quad 1, \quad 1\}, \quad \vec{\varphi}_2 = \{-1, \quad -1, \quad 1, \quad 1\}, \\ \vec{\varphi}_3 &= \{1, \quad -1, \quad -1, \quad 1\}, \quad \vec{\varphi}_4 = \{-1, \quad 1, \quad -1, \quad 1\}, \end{aligned} \quad (12)$$

где λ_i – собственные значения, а $\vec{\varphi}_i$ – собственные векторы, определяемые с точностью до произвольного нормировочного множителя.

Задание. В системе MAPLE получите решение (12), используя функцию Eigenvectors из библиотеки LinearAlgebra.

Программа на языке MAPLE для выполнения задания:

```
> restart;
> with(LinearAlgebra):
> M := Matrix(4,4,[[2,-1,0,-1],[-1,2,-1,0],[0,-1,2,-1],[-1,0,-1,2]]);
> Eigenvectors(M);
```

Возвращаясь к первоначальным обозначениям нашей задачи, находим $\lambda_i = \omega_i^2$ ($i = 1, 2, 3, 4$), $\vec{\varphi}_i = \{A_1^{(i)}, A_2^{(i)}, A_3^{(i)}, A_4^{(i)}\}$. Таким образом, мы получили набор собственных частот ($\omega_1 = 0$, $\omega_2 = \omega_3 = \sqrt{2}$, $\omega_4 = 2$) и соответствующих им шаблонов смещений атомов цепочки (12).

Они представляют собой четыре *частных решения* исходной задачи (3). Каждое из них описывает режим, в котором все атомы цепочки совершают гармонические колебания с одной и той же частотой, но, вообще говоря, разными амплитудами и фазами, определяемыми собственными векторами из (12). Такие решения называются *нормальными модами*. Каждая мода характеризуется частотой ω_j , определяющей временную зависимость $e^{i\omega_j t}$, и вектором $\vec{\varphi}_j$, определяющим шаблон атомных смещений. Например, первую нормальную моду мы можем записать форме

$$\vec{X}^{(1)}(t) = \vec{\varphi}_1 e^{i\omega_1 t} \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\omega_1 t}, \quad (13)$$

где $\vec{X}(t) = \{x_1(t), x_2(t), x_3(t), x_4(t)\}$ – вектор, задающий атомные смещения в любой момент времени.

Итак, выше были найдены четыре частных решения системы (3), и теперь мы хотим построить *общее* ее решение. Здесь необходимо вспомнить, что согласно теории дифференциальных уравнений, общее решение *линейной*

системы ОДУ может быть представлено как линейная комбинация *всех линейно независимых* частных решений (которые в таком случае образуют *базис*). Поэтому следует проверить, образуют ли полученные нами решения полный набор линейно независимых частных решений системы (3). Другими словами, следует выяснить, не является ли сумма $\sum_{j=1}^4 m_j e^{i\omega_j t} \vec{\varphi}_j$ равной нулю только при *всех* коэффициентах m_j равных нулю. Очевидно, что для этого достаточно проверить являются ли линейно независимыми векторы $\vec{\varphi}_j$.

С другой стороны, $\vec{\varphi}_j$ являются собственными векторами *симметричной* матрицы, и из курса линейной алгебры известно, что в силу этого они являются линейно независимыми. Более того, они всегда могут быть *выбраны* ортогональными друг другу, т. е. скалярное произведение $(\vec{\varphi}_i, \vec{\varphi}_j)$ любой их пары ($i \neq j$) равно нулю. Действительно, собственные векторы, соответствующие *разным* собственным значениям, оказываются ортогональными автоматически, а те, которые соответствуют *одинаковым* (вырожденным) собственным значениям (напомним, что в нашем случае $\lambda_2 = \lambda_3 = 2$), могут быть сделаны ортогональными “вручную”. Этого можно добиться за счет соответствующего перевыбора базисных векторов, в тех *подпространствах*, которые отвечают *вырожденным* собственным значениям (см., например, обсуждение этого вопроса в [10]).

Задание. Убедитесь в том, что собственные векторы из (12) образуют ортогональный базис.

Из вышесказанного следует, что *любое* решение системы дифференциальных уравнений (3) может быть представлено в виде разложения по базису, определенному совокупностью всех нормальных мод:

$$\vec{X}(t) = \sum_{j=1}^4 B_j e^{i\omega_j t} \vec{\varphi}_j = \sum_{j=1}^4 \nu_j(t) \vec{\varphi}_j, \quad (14)$$

где B_j – некоторые постоянные коэффициенты.

Уточняя терминологию, заметим, что собственные векторы $\vec{\varphi}_j$ ($j = 1, 2, 3, 4$) обычно называются *нормальными координатами*, а их произведение на соответствующие периодические во времени функции $e^{i\omega_j t}$ именуются нормальными модами.

Вместо исходных степеней свободы, представляющих собой смещения $x_i(t)$ всех $N = 4$ атомов из своих положений равновесия, с помощью формулы (14) можно ввести некоторые новые степени свободы – $\nu_j(t)$, $j = 1, \dots, N$. При этом общее решение системы дифференциальных уравнений, даваемое формулой (14), можно рассматривать как разложение вектора $\vec{X}(t)$ по нормальным координатам.

Формула (14) фактически определяет переход от новых переменных $[\nu_j(t)]$ к старым переменным $[x_i(t)]$:

$$\begin{aligned} x_1(t) &= \nu_1(t) - \nu_2(t) + \nu_3(t) - \nu_4(t), \\ x_2(t) &= \nu_1(t) - \nu_2(t) - \nu_3(t) + \nu_4(t), \\ x_3(t) &= \nu_1(t) + \nu_2(t) - \nu_3(t) - \nu_4(t), \\ x_4(t) &= \nu_1(t) + \nu_2(t) + \nu_3(t) + \nu_4(t). \end{aligned} \quad (15)$$

Обратный переход от старых переменных $x_i(t)$ к новым переменным $\nu_j(t)$, в принципе, достигается в результате решения системы линейных алгебраических уравнений (15) относительно переменных $\nu_j(t)$. На практике, однако, решать эту систему не требуется, поскольку обратная матрица системы (15) заведомо

известна: можно показать, что ее строки суть уже известные нам собственные векторы $\vec{\varphi}_j$ ($j = 1, \dots, N$).

Задание. Проверьте это утверждение и найдите, таким образом, из системы (15) явное выражение новых степеней свободы $v_j(t)$ через старые динамические переменные $x_j(t)$ ($j = 1, \dots, N$).

Программа на языке MAPLE для выполнения задания:

```
> restart;
> with(LinearAlgebra):
> M1 := Matrix(4,4,[[1,-1,1,-1],[1,-1,-1,1],[1,1,-1,-1],[1,1,1,1]]);
> M2 := Matrix(4,4,[[1,1,1,1],[-1,-1,1,1],[1,-1,-1,1],[-1,1,-1,1]]);
> MatrixMatrixMultiply(M1,M2);
```

Представляет интерес переписать систему исходных дифференциальных уравнений (3) в новых динамических переменных $v_j(t)$ ($j = 1, \dots, N$). Для этого надо подставить в уравнения (3) выражения старых переменных $x_i(t)$ через новые $v_j(t)$ согласно формулам (15). Далее нужно сделать преобразование полученных уравнений таким образом, чтобы в каждое из этих уравнений входила вторая производная *только одной* новой переменной $[v_j(t)]$.

Во избежание громоздких математических выкладок проиллюстрируем выполнение этой процедуры на примере цепочки из двух атомов с периодическими граничными условиями. Как мы видели при решении уравнений (8), в этом случае имеются только две нормальные моды, определяемые собственными векторами (11). В силу уравнений типа (15) они связаны с атомными смещениями следующим образом:

$$\begin{aligned}x_1(t) &= v_1(t) + v_2(t), \\x_2(t) &= v_1(t) - v_2(t),\end{aligned}\tag{16}$$

Подставляя (16) в уравнения движения (7) для рассматриваемой цепочки из двух атомов, имеем:

$$\begin{aligned}\ddot{v}_1 + \ddot{v}_2 &= -4v_2, \\ \ddot{v}_1 - \ddot{v}_2 &= 4v_2.\end{aligned}\tag{17}$$

Складывая и вычитая эти уравнения, получаем систему уравнений для новых переменных $v_j(t)$:

$$\begin{aligned}\ddot{v}_1 &= 0, \\ \ddot{v}_2 &= -4v_2.\end{aligned}\tag{18}$$

Указанная процедура для цепочки из четырех атомов приводит к более громоздким выкладкам, и, при необходимости, для ее выполнения может быть использована система MAPLE. В результате мы должны получить следующую систему *независимых* уравнений

$$\begin{aligned}\ddot{v}_1 &= 0, \\ \ddot{v}_2 &= -2v_2, \\ \ddot{v}_3 &= -2v_3, \\ \ddot{v}_4 &= -4v_4.\end{aligned}\tag{19}$$

Эти же результаты можно получить, используя для преобразования системы уравнений, полученной подстановкой выражений для старых переменных через новые, т. е. системы типа (17), *обратную матрицу*, построенную из собственных векторов $\{\vec{\varphi}_1, \vec{\varphi}_2, \vec{\varphi}_3, \vec{\varphi}_4\}$, о которой шла речь в предыдущем задании.

I Задание. В системе MAPLE получите уравнения (19).

Программа на языке MAPLE для выполнения задания:

```
> restart;
```

```

> N:=4;
> x[0](t):=x[N](t);x[N+1](t):=x[1](t);
> sys:=seq(diff(x[n](t),t$2)=-2*x[n](t)+x[n+1](t)+x[n-1](t),n=1..N);
> s := x[1](t) = nu[1](t)-nu[2](t)+nu[3](t)-nu[4](t),
    x[2](t) = nu[1](t)-nu[2](t)-nu[3](t)+nu[4](t),
    x[3](t) = nu[1](t)+nu[2](t)-nu[3](t)-nu[4](t),
    x[4](t) = nu[1](t)+nu[2](t)+nu[3](t)+nu[4](t);
> (sys2[1] + sys2[2] + sys2[3] + sys2[4])/4;
> (-sys2[1] - sys2[2] + sys2[3] + sys2[4])/4;
> (sys2[1] - sys2[2] - sys2[3] + sys2[4])/4;
> (-sys2[1] + sys2[2] - sys2[3] + sys2[4])/4;

```

Задание. Получите уравнение (19) с помощью вышеуказанной обратной матрицы.

Программа на языке MAPLE для выполнения задания:

```

> restart;
> N:=4;
> x[0](t):=x[N](t);x[N+1](t):=x[1](t);
> sys:=seq(diff(x[n](t),t$2)=-2*x[n](t)+x[n+1](t)+x[n-1](t),n=1..N);
> with(LinearAlgebra):
> Phi:=Matrix(4,4,[[1,-1,1,-1],[1,-1,-1,1],[1,1,-1,-1],[1,1,1,1]]);
> X:=Vector(N,[seq(x[i](t),i=1..N)]);
> M:=Vector(N,[seq(nu[i](t),i=1..N)]);
> s:=seq(X[n]=MatrixVectorMultiply(Phi,M)[n],n=1..N);
> s2:=Vector(N,[seq(rhs(sys[i]),i=1..N)]);
> s3:=MatrixVectorMultiply(Transpose(Phi),s2);
> sys2:=seq(diff(M[n],t$2)=simplify(subs(s,s3[n])/N),n=1..N);

```

Решением каждого из уравнений (19) как раз и будут введенные нами изначально гармонические функции вида $A_j e^{i\omega_j t}$. Таким образом, мы свели нашу систему *связанных* осцилляторов к системе *независимых* осцилляторов. Каждая из переменных $v_j(t)$ описывает динамику одной из нормальных мод.

В заключение следует отметить, что переменная v_1 , соответствующая вектору $\varphi_1 = \{1, 1, 1, 1\}$ отвечает за движение системы как целого. Это объясняет полученное для нее уравнение $\ddot{v}_1 = 0$, поскольку в нашем случае отсутствует возвращающая сила, действующая на всю цепочку целиком.

В данном разделе мы познакомились с моделью моноатомной цепочки и на этом простом примере пришли к понятию о нормальных модах, являющемуся одним из наиболее важных понятий в теории динамических систем.

3 ГРУППЫ СИММЕТРИИ

При изучении настоящего методического пособия знание теории групп не предполагается. Основные ее понятия и методы, которые используются при исследовании нелинейной динамики систем с дискретной симметрией, будут излагаться в тексте по мере необходимости.

3.1 Простейшие примеры групп симметрии

Рассмотрим механическую систему из трех одинаковых по массе материальных точек (которые будем называть атомами), взаимодействующих друг с другом по некоторому неизвестному нам закону, равновесная конфигурация которой представляет собой равносторонний треугольник, изображенный на рисунке 4 (для определенности можно, например, предполагать, что взаимодействие между атомами описывается известным потенциалом Леннарда-Джонса). Эта равновесная конфигурация обладает вполне определенной *группой симметрии*, которая определяется набором всех возможных *элементов*

симметрии. Под термином “элемент симметрии” данного геометрического объекта (в нашем случае таковым является равновесная конфигурация) понимается такое преобразование трехмерного евклидова пространства, при котором вид этого объекта не изменяется. Иными словами, атомная конфигурация остается инвариантной под действием своих элементов симметрии.

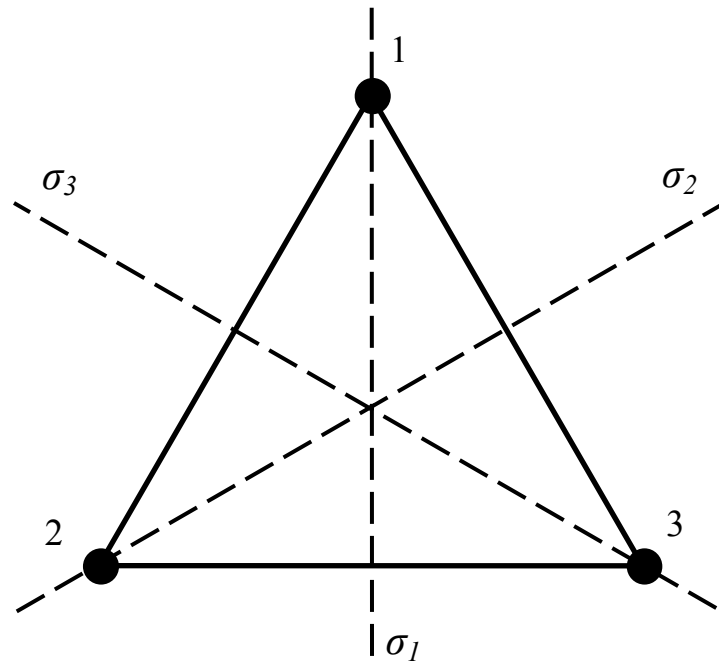


Рисунок 4 – Равносторонний треугольник

Очевидно, что треугольник, изображенный на рисунке 4 совмещается сам с собой при *поворотах* на 0° , 120° и 240° вокруг своего центра. Поэтому говорят, что через центр равностороннего треугольника перпендикулярно к его плоскости проходит *ось симметрии* третьего порядка.

Определение. В общем случае *порядок оси* (n) определяется отношением полного угла 360° к минимальному по величине углу вращения φ_0 , который оставляет рассматриваемый объект инвариантным ($n = 360^\circ/\varphi_0$).

Заметим, что поворот на 240° можно рассматривать и как единый поворот, и как последовательность из двух поворотов на 120° . В последнем случае говорят о *произведении* элементов симметрии.

Определение. Произведением двух преобразований (элементов) симметрии a и b называется третье преобразование (элемент) $c = a \cdot b$, которое заключается в последовательном действии на рассматриваемой объект сначала преобразования b , а затем преобразования a .

Очевидно, что произведение любых двух элементов симметрии также является элементом симметрии данного объекта.

Равносторонний треугольник, изображенный на рисунке 4, является также инвариантным по отношению к действию на него *плоскостей зеркального отражения*, которые перпендикулярны плоскости рисунка и проходят через одну из вершин треугольника и его центр*. На рисунке 4 эти плоскости зеркального отражения изображены пунктирными линиями и обозначены символами σ_1 , σ_2 и σ_3 .

Кроме того, каждый объект, очевидно, имеет в качестве элемента симметрии единичный (тождественный) элемент, действие которого сводится к тому, что он “ничего не делает”. В нашем случае его роль играет поворот на 0° .

Каждый из перечисленных элементов симметрии, действующих на все евклидово пространство, определенным образом переставляет атомы рассматриваемой нами сейчас треугольной конфигурации:

$$g_1(\text{тождественный элемент}) \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix},$$

* Зеркальные плоскости как элементы симметрии были впервые введены Мёбиусом, известным многим по открытию односторонних поверхностей (лист Мёбиуса).

$$\begin{aligned}
g_2(\text{поворот на } 120^\circ) &\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}, \\
g_3(\text{поворот на } 240^\circ) &\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \\
g_4(\text{зеркальное отражение } \sigma_1) &\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}, \\
g_5(\text{зеркальное отражение } \sigma_2) &\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \\
g_6(\text{зеркальное отражение } \sigma_3) &\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{20}$$

В этих формулах каждому элементу симметрии сопоставлена некоторая перестановка атомов, рассматриваемой нами конфигурации. Запись вида $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ означает, что первый атом переходит на место с номером m_1 , второй – на место с номером m_2 , а третий – на место с номером m_3 (каждый из индексов m_1 , m_2 и m_3 может принимать значение 1, 2, 3, причем, $m_1 \neq m_2 \neq m_3$).

Уже отмечалось, что произведение любых двух элементов симметрии g_i и g_j также является некоторым элементом симметрии g_k рассматриваемого нами объекта. Например, $g_2 \cdot g_4 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}$. Отсюда видно, что произведение элементов g_2 и g_4 эквивалентно действию на наш объект (равносторонний треугольник) элемента симметрии g_6 [см. формулы (20)]. Таким образом, можно утверждать, что $g_2 \cdot g_4 = g_6$.

Полный набор, состоящий из шести элементов симметрии равностороннего треугольника, образует *группу симметрии*, которая в стандартной символике Шенфлиса имеет обозначение C_{3v} . Этот символ говорит о том, что

рассматриваемый геометрический объект обладает осью третьего порядка (которой соответствуют повороты g_1 , g_2 и g_3 , причем, минимальный угол вращения равен $360^\circ/3 = 120^\circ$) и вертикальными (отсюда индекс v – “vertical”) плоскостями зеркального отражения (элементы симметрии g_4 , g_5 и g_6).

Рассмотрим еще один пример группы симметрии, которая отвечает равновесной плоской атомной конфигурации (мы будем называть ее “молекулой”) из четырех одинаковых частиц, находящихся в углах квадрата, приведенного на рисунке 5, и изображенных кружками. Около каждого из них указан номер атома и его (x, y) координаты по отношению к центру квадрата. Мы будем предполагать, что атомы могут осциллировать относительно своих положений равновесия только в плоскости XU и, следовательно, нашей механической системе соответствуют восемь степеней свободы.

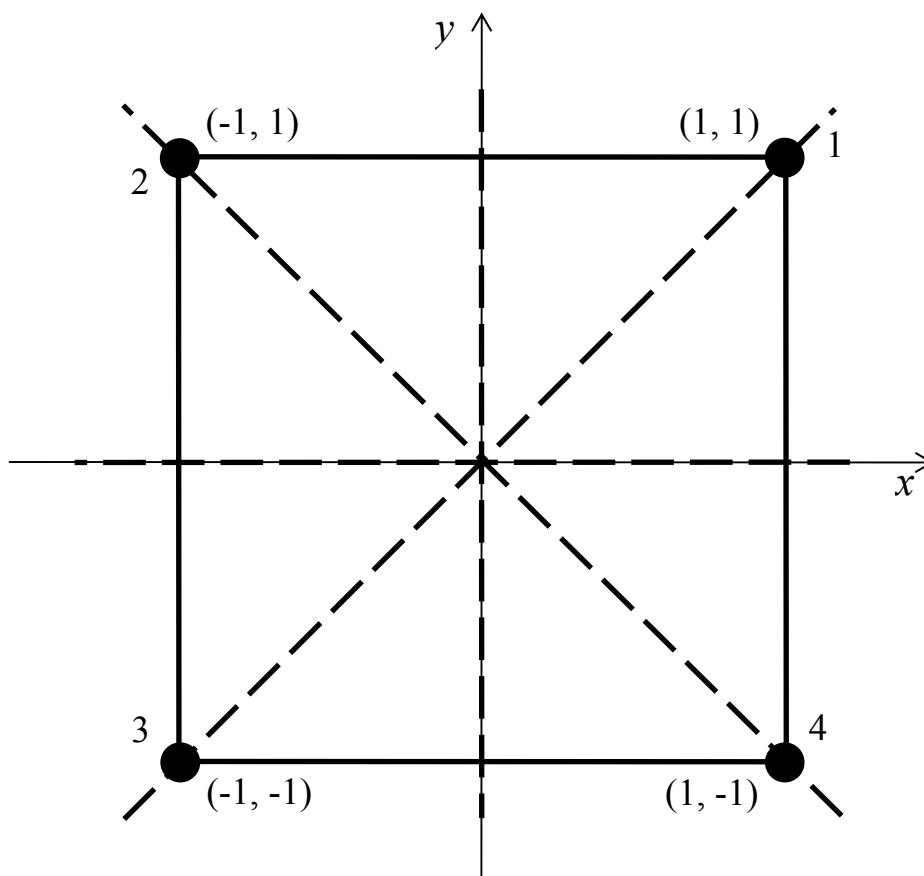


Рисунок 5 – Квадратная молекула

Будучи квадратной, равновесная конфигурация рассматриваемой молекулы обладает группой симметрии C_{4v} (в обозначениях Шенфлиса). Перечислим все элементы симметрии этой конфигурации:

- повороты на углы 0° , 90° , 180° , 270° относительно оси Z , перпендикулярной плоскости рисунка 5 и проходящей через центр квадрата. Мы будем обозначать эти элементы символами g_1 , g_2 , g_3 и g_4 , соответственно;
- отражения в четырех зеркальных плоскостях, перпендикулярных плоскости рисунка 5 и проходящих через ось Z (эти плоскости изображены пунктирными линиями). Две из них являются “координатными” плоскостями, а две другие “диагональными” плоскостями. Координатные плоскости (обозначим их g_5 и g_7) перпендикулярны координатным осям X и Y , соответственно [двумерные векторы $(1, 0)$ и $(0, 1)$ суть нормали этих плоскостей]. Зеркальные плоскости, обозначаемые символами g_6 и g_8 , проходят через диагонали квадрата [нормали к ним определяются, соответственно, двумерными векторами $(1, 1)$ и $(-1, 1)$].

Вышеуказанные элементы симметрии могут быть определены следующими формулами:

$$\begin{aligned}
 g_1(x, y) &= (x, y) && \text{– тождественный элемент;} \\
 g_2(x, y) &= (-y, x) && \text{– вращение на } 90^\circ \text{ (против часовой стрелки);} \\
 g_3(x, y) &= (-x, -y) && \text{– вращение на } 180^\circ \text{ (против часовой стрелки);} \\
 g_4(x, y) &= (y, -x) && \text{– вращение на } 270^\circ \text{ (против часовой стрелки);} \\
 g_5(x, y) &= (-x, y) && \text{– зеркальное отражение в плоскости } (1, 0); \\
 g_6(x, y) &= (-y, -x) && \text{– зеркальное отражение в плоскости } (1, 1); \\
 g_7(x, y) &= (x, -y) && \text{– зеркальное отражение в плоскости } (0, 1);
 \end{aligned}
 \tag{21}$$

$g_8(x, y) = (y, x)$ – зеркальное отражение в плоскости $(-1, 1)$.

Здесь мы определяем каждый элемент симметрии с помощью указания его действия на произвольную точку плоскости (x, y) . Например, g_2 , будучи вращением на угол 90° вокруг оси Z , переводит точку (x, y) в точку $(-y, x)$, то есть под действием этого преобразования $x \rightarrow -y$, $y \rightarrow x$. В формулах (21) плоскости отражения представлены своими нормальными, представляющими собой двумерные векторы, указанные в конце строк, которые определяют данный элемент.

Определение. Полный набор всех элементов симметрии рассматриваемого геометрического объекта представляет собой его *группу симметрии*.

Таким образом, группа G равновесной конфигурации квадратной молекулы есть $G = \{g_1, g_2, g_3, g_4, g_5, g_6, g_7, g_8\}$ (в фигурных скобках мы приводим *полный* список элементов группы), где элементы $^* g_i \in G$ определены соотношениями (21). В обозначениях Шенфлиса это группа C_{4v} .

Определение. *Абстрактная группа G* представляет собой набор элементов $g_i \in G$, которые удовлетворяют следующим четырем аксиомам:

1. На множестве элементов $g_i \in G$ определена некоторая *бинарная операция* (обычно называемая *умножением*), которая сопоставляет каждой паре элементов g_1 и g_2 группы G некоторый третий элемент g_3 : $g_1 \cdot g_2 \Rightarrow g_3$. В традиционных обозначениях это соотношение записывается в виде $g_1 \cdot g_2 = g_3$. Таким образом, полный набор элементов группы должен быть замкнутым относительно операции группового умножения: если $g_1 \in G$ и $g_2 \in G$, то $g_1 \cdot g_2 \in G$.

* Запись $g_i \in G$ означает, что элемент g_i *принадлежит* группе G .

2. В группе G существует элемент $e \in G$, называемый *единичным элементом* и удовлетворяющий соотношению $g \cdot e = e \cdot g = g$, которое справедливо для любого элемента $g \in G$.
3. Для каждого элемента $g \in G$ в группе G имеется *обратный элемент*, обозначаемый символом g^{-1} , который удовлетворяет соотношению $g \cdot g^{-1} = g^{-1} \cdot g = e$.
4. Операция умножения является *ассоциативной*, то есть выполняется соотношение $(g_1 \cdot g_2) \cdot g_3 = g_1 \cdot (g_2 \cdot g_3)$ для любых трех элементов группы G .

В общем случае не все элементы группы G коммутируют друг с другом, то есть в группе могут найтись такие элементы $g_1 \in G$ и $g_2 \in G$, для которых $g_1 \cdot g_2 \neq g_2 \cdot g_1$.

Определение. Если *все* элементы данной группы коммутируют друг с другом, то такая группа называется *абелевой*.

Определение. Число элементов конечной группы G называется *порядком* этой группы. Обычно он обозначается символом $\|G\|$.

Группа симметрии квадратной молекулы C_{4v} состоит из восьми элементов g_1, g_2, \dots, g_8 , геометрический смысл которых определен формулами (21). Проверим выполнение для нее групповых аксиом.

Как было указано ранее, произведением двух элементов симметрии является третий элемент, действие которого заключается в последовательном (справа налево) применении перемножаемых элементов симметрии, что свидетельствует о выполнении первой аксиомы.

Роль единичного элемента e играет элемент g_1 , который “ничего не делает” (его можно рассматривать как вращение на 0° , т.е. тождественное

преобразование). Очевидно, он удовлетворяет требованию второй аксиомы ($g \cdot e = e \cdot g = g$).

Нахождение обратных элементов будет различно для вращений и отражений. Для вращения на угол α обратным элементом будет вращение на угол, равный $(360^\circ - \alpha)$. В нашем случае вращения на углы 90° и 270° являются взаимно обратными элементами симметрии, а вращение на 180° является обратным элементом для самого себя. Плоскости зеркального отражения, очевидно, также сами для себя являются обратными элементами симметрии: совершив одно и тоже отражение два раза (“туда и обратно”), мы в результате ничего не изменим, что доказывает существование обратных элементов и для зеркальных плоскостей. Таким образом, мы полностью доказали выполнение третьей аксиомы.

Заметим, что найти обратный элемент для произведения двух элементов можно из самых общих соображений.

Утверждение. Элемент, обратный произведению любых двух элементов группы есть произведение их обратных элементов, взятое в *обратном порядке*.

$$\text{Действительно, } (g_i g_j)(g_j^{-1} g_i^{-1}) = g_i g_j g_j^{-1} g_i^{-1} = g_i g_i^{-1} = e.$$

Выполнение четвертой аксиомы очевидно, так как согласно определению произведения элементов симметрии и в случае $(g_i \cdot g_j) \cdot g_k$, и в случае $g_i \cdot (g_j \cdot g_k)$ сначала действует элемент g_k , затем g_j , и, наконец, g_i .

Группа C_{4v} является *неабелевой*. Для того чтобы это показать, достаточно найти такие два элемента рассматриваемой группы, которые не удовлетворяют условию коммутации, то есть для которых имеет место соотношение $g_i \cdot g_j \neq g_j \cdot g_i$. В нашем случае такими элементами являются, например, g_2 и g_8 . Действительно, $g_2 \cdot g_8 = g_5$, поскольку $g_2 \cdot g_8(x, y) = g_2(y, x) = (-x, y)$, что совпадает с результатом действия на произвольную точку (x, y) элемента группы

g_5 . Аналогично можно показать, что $g_8 \cdot g_2 = g_7$, из чего следует, что группа C_{4v} не является абелевой.

Задание. Используя определения (21) элементов группы $G = C_{4v}$ показать, что $g_8 \cdot g_2 = g_7$.

Задание. Используя определения (21) элементов группы $G = C_{4v}$ построить самостоятельно таблицу группового умножения, которая определяет правила сопоставления любой паре элементов группы некоторого третьего ее элемента.

В результате выполнения этого задания должна получиться следующая таблица.

Таблица 1

g_1	g_2	g_3	g_4	g_5	g_6	g_7	g_8
g_2	g_3	g_4	g_1	g_6	g_7	g_8	g_5
g_3	g_4	g_1	g_2	g_7	g_8	g_5	g_6
g_4	g_1	g_2	g_3	g_8	g_5	g_6	g_7
g_5	g_8	g_7	g_6	g_1	g_4	g_3	g_2
g_6	g_5	g_8	g_7	g_2	g_1	g_4	g_3
g_7	g_6	g_5	g_8	g_3	g_2	g_1	g_4
g_8	g_7	g_6	g_5	g_4	g_3	g_2	g_1

В этой таблице на пересечении строки с номером i и столбца с номером j указан элемент g_k , который является произведением элементов g_i и g_j ($g_k = g_i \cdot g_j$).

Такие таблицы часто называют таблицами Кэли. Таблицы Кэли полностью определяют *абстрактную* группу. Говоря это мы имеем ввиду, что восемь элементов g_1, g_2, \dots, g_8 такой абстрактной группы могут интерпретироваться по-разному, то есть они могут не иметь никакого отношения к элементам симметрии какого-либо геометрического объекта, а являться, например, некоторыми квадратными матрицами или перестановками и т. д.

Задание. Постройте таблицу умножения группы C_{3v} , элементы которой определены формулами (20) как некоторые перестановки трех объектов. Проверьте, является ли она абелевой.

3.2 Подгруппы групп симметрии

В дальнейшем нам понадобится умение находить *подгруппы* групп симметрии механической системы в состоянии равновесия (или группы симметрии ее уравнений движения), поскольку разные динамические режимы этой системы можно классифицировать именно по подгруппам ее группы симметрии.

Определение. Любое подмножество элементов группы G представляет собой некоторую ее подгруппу G_1 , если оно само по себе удовлетворяет всем четырем групповым аксиомам.

При этом тот факт, что G_1 является подгруппой группы G , записывается в виде $G_1 \subset G$.

Группа $G = C_{4v}$ имеет восемь существенно различных подгрупп [Совпадение этого числа с порядком самой группы C_{4v} ($\|G\| = 8$) является чистой случайностью].

Утверждение. Согласно теореме Лагранжа порядок любой подгруппы G_1 группы G является *делителем* порядка этой группы, то есть $\|G\|/\|G_1\|$ есть целое число.

Доказательство этой теоремы можно найти в любом учебнике по теории групп (см., например, [2, 4]).

Вследствие этой теоремы в случае группы $G = C_{4v}$, порядок которой $\|G\| = 8$, могут быть только подгруппы G_j , порядки $\|G_j\|$ которых равны целым числам 1, 2, 4, 8. (Других делителей у порядка $\|G\| = 8$ нет).

Достаточно легко получить следующий список этих подгрупп:

$$m = 1: \quad G_1 = \{g_1\} = C_1$$

$$m = 2: \quad G_2 = \{g_1, g_3\} = C_2$$

$$G_3 = \{g_1, g_5\} = C_s^c \quad \text{и} \quad G'_3 = \{g_1, g_7\} = C_s^c$$

$$G_4 = \{g_1, g_6\} = C_s^d \quad \text{и} \quad G'_4 = \{g_1, g_8\} = C_s^d$$

$$m = 4: \quad G_5 = \{g_1, g_2, g_3, g_4\} = C_4$$

$$G_6 = \{g_1, g_3, g_5, g_7\} = C_{2v}^c$$

$$G_7 = \{g_1, g_3, g_6, g_8\} = C_{2v}^d$$

$$m = 8: \quad G_8 = \{g_1, g_2, g_3, g_4, g_5, g_6, g_7, g_8\} = C_{4v}$$

Прокомментируем этот список подгрупп группы C_{4v} .

$G_1 = C_1$ есть тривиальная подгруппа, состоящая из одного единичного элемента $g_1 = e$.

$G_2 = C_2$ кроме тождественного элемента $g_1 = e$ содержит вращение на угол 180° вокруг оси Z .

$G_3 = C_s^c$ и $G'_3 = C_s^c$ представляют собой две *взаимно сопряженные подгруппы* (определение этого понятия дано ниже). Кроме единичного элемента g_1 они содержат *координатную* зеркальную плоскость (ортогональную к оси X для подгруппы G_3 и ортогональную к оси Y для подгруппы G'_3). Ясно, что эти плоскости g_5 и g_7 в некотором смысле равноправны в группе $G = C_{4v}$.

$G_4 = C_s^d$ и $G'_4 = C_s^d$ также являются сопряженными подгруппами в группе $G = C_{4v}$. Они отличаются друг от друга тем, что плоскость зеркального отражения в G_4 ортогональна одной диагонали квадрата, а в G'_4 – второй его диагонали.

$G_5 = C_4$ есть подгруппа содержащая все вращения вокруг оси Z .

$G_6 = C_{2v}^c$ содержит два отражения g_5 и g_7 в плоскостях, ортогональных координатным осям X и Y , а также вращение на угол 180° вокруг оси Z , которая является пересечением этих плоскостей. Действительно, используя таблицу 1, находим, что $g_5 \cdot g_7 = g_3$.

$G_7 = C_{2v}^d$ имеет структуру, аналогичную подгруппе G_6 , но содержит отражения относительно *диагональных* зеркальных плоскостей (вместо отражений в координатных плоскостях, как это имело место в подгруппе G_6).

$G_8 = C_{4v}$ совпадает с полной группой $G = C_{4v}$.

Заметим, что здесь и далее для точечных групп симметрии использованы обозначения Шенфлиса. Чтобы делать различия между координатными и диагональными ориентациями некоторых подгрупп в группе $G = C_{4v}$ мы использовали дополнительные верхние индексы (“ c ” и “ d ”, соответственно, около символов Шенфлиса C_s^c и C_s^d , C_{2v}^c и C_{2v}^d).

Определение. Две подгруппы G_1 и G_2 группы G ($G_1 \subset G, G_2 \subset G$) называются *сопряженными* ($G_1 \sim G_2$), если существует элемент g_0 группы G ($g_0 \in G$), преобразующий G_1 в G_2 посредством преобразования $G_2 = g_0^{-1}G_1g_0$.

В качестве примера рассмотрим подгруппы $G_3 = \{g_1, g_5\}$ и $G'_3 = \{g_1, g_7\}$ группы C_{4v} , состоящие из двух элементов каждая. Для этого выберем такой элемент g_0 , под действием которого *все* элементы подгруппы G_3 переходят в соответствующие элементы подгруппы G'_3 , т.е. $g_{k'} = g_0^{-1}g_kg_0$, где $g_{k'} \in G'_3$, $g_k \in G_3$. Элемент $g_1 = e$ переходит сам в себя под действием любого элемента группы: $g_0^{-1}eg_0 = g_0^{-1}g_0 = e$. Из таблицы 1 можно видеть, что выбранный в качестве элемента g_0 элемент g_2 переводит g_5 в g_7 : $g_2^{-1}g_5g_2 = g_4g_5g_2 = g_8g_2 = g_7$. А это и означает, что подгруппа G_3 является сопряженной подгруппе G'_3 ($G_3 \sim G'_3$), причем, их сопряжение производится посредством элемента g_2 : $G'_3 = g_2^{-1}G_3g_2$.

4 СИММЕТРИЯ НОРМАЛЬНЫХ МОД

4.1 Симметрия равновесной конфигурации моноатомной цепочки

Определим элементы симметрии равновесной конфигурации моноатомной цепочки, рассмотренной в разделе 2. Она инвариантна относительно трансляции (вдоль цепочки) на одно равновесное межатомное расстояние. Однако, при этом, как и при составлении уравнений движения, нам необходимо доопределить действие операции трансляции на крайние атомы. Периодическим граничным условиям соответствует доопределение трансляции, заключающееся в том, что данное преобразование осуществляет *циклическую перестановку* атомов цепочки, изображенную на рисунке 6.

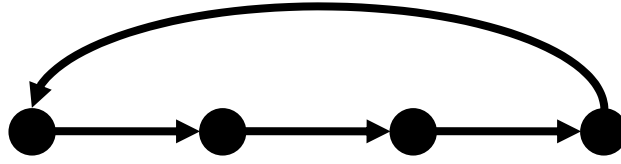


Рисунок 6 – Циклическая перестановка атомов цепочки
под действием операции трансляции

Особенно наглядным становится смысл данного доопределения, если обратиться к представлению о цепочке с периодическими граничными условиями как о цепочке замкнутой в кольцо, (см. рисунок 3). Тогда введенное нами преобразование трансляции должно рассматриваться как поворот этого кольца на угол $\varphi = 360^\circ/N$, где N – число атомов в цепочке.

Одновременно с перестановкой атомов осуществляется и перестановка атомных смещений. Нам будет удобно определять элемент симметрии его действием на конфигурационный вектор $\vec{X}(t) = \{x_1(t), x_2(t), x_3(t), x_4(t)\}$. Введенному преобразованию трансляции соответствует оператор \hat{a} , действующий на вектор $\vec{X}(t)$ следующим образом:

$$\hat{a}\vec{X}(t) = \hat{a}\{x_1(t), x_2(t), \dots, x_{N-1}(t), x_N(t)\} = \{x_N(t), x_1(t), x_2(t), \dots, x_{N-1}(t)\}. \quad (22)$$

Этот оператор генерирует трансляционную группу

$$T = \{\hat{e}, \hat{a}, \hat{a}^2, \dots, \hat{a}^{N-1}\}, \quad \hat{a}^N = \hat{e}, \quad (23)$$

где \hat{e} – единичный элемент, N – порядок циклической группы T , равный числу атомов в рассматриваемой цепочке.

Полная группа симметрии моноатомной цепочки содержит также операцию инверсии относительно центра цепочки. Соответствующий ей оператор \hat{i} действует на вектор $\vec{X}(t)$ следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{i}\vec{X}(t) &= \hat{i}\{x_1(t), x_2(t), \dots, x_{N-1}(t), x_N(t)\} = \\ &= \{-x_N(t), -x_{N-1}(t), \dots, -x_2(t), -x_1(t)\}. \end{aligned} \quad (24)$$

Операторы \hat{a} , \hat{i} и все их произведения составляют полную группу симметрии моноатомной цепочки, которая является так называемой группой диэдра D . В рассматриваемом нами случае $N = 4$ в обозначениях Шенфлиса это группа D_4 . Она состоит из следующих восьми элементов:

$$D_4 = \{\hat{e}, \hat{a}, \hat{a}^2, \hat{a}^3, \hat{i}, \hat{a}\hat{i}, \hat{a}^2\hat{i}, \hat{a}^3\hat{i}\}. \quad (25)$$

Задание. Подействовав соответствующими операторами на вектор $\vec{X}(t)$, убедитесь в том, что $\hat{i}\hat{a} = \hat{a}^3\hat{i}$, $\hat{i}\hat{a}^2 = \hat{a}^2\hat{i}$ и $\hat{i}\hat{a}^3 = \hat{a}\hat{i}$.

Утверждение. Вместо определения абстрактной группы путем составления таблицы Кэли группа может быть задана ее *генераторами* и *определяющими соотношениями*, имеющими форму уравнений, которым эти генераторы удовлетворяют.

Рассматриваемая группа диэдра D имеет два генератора (\hat{a} и \hat{i}) и может быть полностью задана следующими тремя определяющими соотношениями:

$$\hat{a}^N = \hat{e}, \quad \hat{i}^2 = \hat{e}, \quad \hat{i}\hat{a} = \hat{a}^{-1}\hat{i}. \quad (26)$$

Задание. Исходя из определяющих соотношений (26), постройте таблицу умножения группы диэдра D для случая $N = 4$.

Рассмотрим геометрическую интерпретацию элементов группы D . Заметим, что в одномерном случае действие инверсии \hat{i} эквивалентно отражению $\hat{\sigma}$ в плоскости перпендикулярной к цепочке и проходящей через ее центр. Согласно известной теореме кристаллографии [11], плоскость симметрии и перпендикулярная к ней трансляция на величину A порождают новую ("вставленную") плоскость симметрии, параллельную исходной плоскости и отстоящую от нее на расстояние $A/2$. Тогда легко видеть, что произведения

$\hat{a}^k \hat{i} \equiv \hat{a}^k \hat{\sigma}$ ($k = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$) порождают семейство параллельных плоскостей отражения, изображенных на рисунке 7 вертикальными линиями. При нечетных значениях k плоскости отражения проходят *через атомы*, а при четных – *между атомами**. Из определяющих соотношений (26) имеем $\hat{a}^{-k} \hat{i} = \hat{i} \hat{a}^k$, в силу чего элементы симметрии $\hat{a}^k \hat{i}$ ($k = 1, 2, 3, \dots$) располагаются справа от центра цепочки, а элементы $\hat{i} \hat{a}^k$ – слева от него.

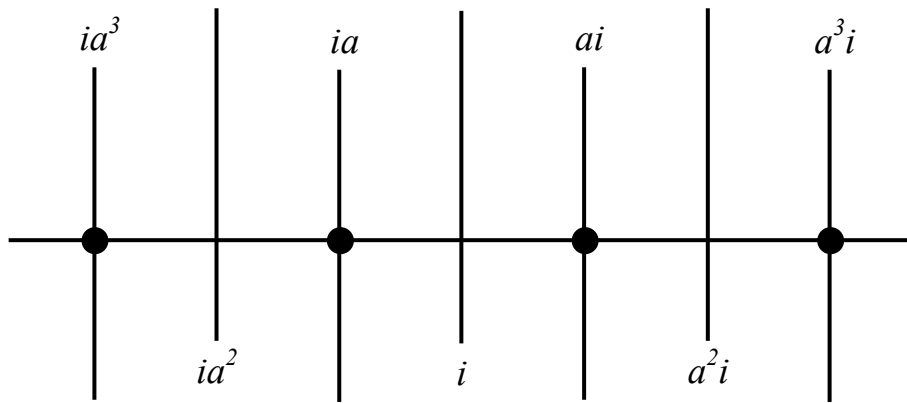


Рисунок 7 – Расположение элементов группы симметрии D моноатомной цепочки

4.2 Симметрия динамических уравнений моноатомной цепочки

Поскольку моноатомная цепочка обладает определенной симметрией, то разумно предположить, что этот факт найдет отражение в ее уравнениях движения. Рассмотрим этот вопрос на примере цепочки из четырех атомов. Проведем в системе (3) замену переменных в соответствии с действием операторов \hat{a} и \hat{i} на компоненты конфигурационного вектора $\vec{X}(t) = \{x_1(t), x_2(t), x_3(t), x_4(t)\}$:

* Это утверждение соответствует четному значению N . В случае нечетности N будет наоборот.

$$\begin{aligned}\hat{a}: & \quad x_1(t) \rightarrow x_4(t), \quad x_2(t) \rightarrow x_1(t), \quad x_3(t) \rightarrow x_2(t), \quad x_4(t) \rightarrow x_3(t), \\ \hat{i}: & \quad x_1(t) \rightarrow -x_4(t), \quad x_2(t) \rightarrow -x_3(t), \quad x_3(t) \rightarrow -x_2(t), \quad x_4(t) \rightarrow -x_1(t).\end{aligned}\quad (27)$$

Легко проверить, что каждое из преобразований (27) приводит к системе эквивалентной системе (3). Более того, эти преобразования действуют на отдельные уравнения u_j ($j = 1, 2, 3, 4$) так же, как и на соответствующие атомные смещения $x_j(t)$ ($j = 1, 2, 3, 4$). Например, для оператора \hat{i} мы имеем:

$$\hat{i}u_1 = -u_4, \quad \hat{i}u_2 = -u_3, \quad \hat{i}u_3 = -u_2, \quad \hat{i}u_4 = -u_1. \quad (28)$$

Очевидно, что некоторая перестановка уравнений и их умножение на ± 1 приведет к системе полностью эквивалентной исходной системе (3).

Задание. Выполнив в явном виде замены переменных (27) в системе (3) убедитесь в том, что полученные в результате системы уравнений эквивалентны исходной.

Программа на языке MAPLE для выполнения задания:

```
> restart;
> N:=4;
> x[0](t):=x[N](t);x[N+1](t):=x[1](t);
> sys:=seq(diff(x[n](t),t$2)=-2*x[n](t)+x[n+1](t)+x[n-1](t),n=1..N);
> s:=x[1](t)=y[4](t), x[2](t)=y[1](t), x[3](t)=y[2](t), x[4](t)=y[3](t);
> seq(simplify(subs(s,sys[n])),n=1..N);
> s:=x[1](t)=-y[4](t), x[2](t)=-y[3](t), x[3](t)=-y[2](t), x[4](t)=-y[1](t);
> seq(simplify(subs(s,sys[n])),n=1..N);
```

Таким образом, мы видим, что группа симметрии равновесной конфигурации рассматриваемой цепочки является и группой симметрии ее уравнений движения.

4.3 Симметрия нормальных мод для моноатомной цепочки

Мы только что видели, что цепочка в состоянии равновесия и ее динамические уравнения обладают определенной симметрией, которая задается группой диэдра D . Рассмотрим теперь вопрос о симметрии колебательного состояния цепочки в режиме нормальных мод.

Операторы \hat{a} и \hat{i} осуществляют перестановки атомных смещений, определяемые формулами (27). Такие перестановки, *вообще говоря*, не будут являться элементами симметрии колеблющейся цепочки в том смысле, что смещение $x_1(t)$ может не быть тождественно равным $x_4(t)$ и т.д. Таким образом, некоторые из найденных для цепочки в состоянии равновесия элементов симметрии не выживают в ее колебательном состоянии.

Рассмотрим нормальные моды, найденные нами для цепочки из четырех атомов, т.е. моды, которым соответствуют векторы $\vec{\varphi}_2$, $\vec{\varphi}_3$ и $\vec{\varphi}_4$ из (12). Легко видеть, что собственный вектор $\vec{\varphi}_2 = \{-1, -1, 1, 1\}$ остается неизменным под действием оператора инверсии, но не трансляции. Это означает, что если в цепочке происходят колебания, описываемые нормальной модой $\nu_2(t)\vec{\varphi}_2$, то в *любой* момент времени колеблющаяся цепочка инвариантна относительно группы симметрии, состоящей из единичного элемента \hat{e} и инверсии \hat{i} , как это изображено на рисунке 8.

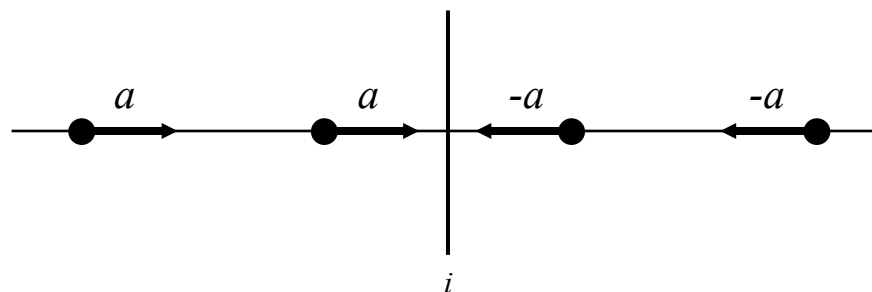


Рисунок 8 – Симметрия моды $\nu_2(t)\vec{\varphi}_2$

Мода, соответствующая вектору $\vec{\varphi}_3 = \{1, -1, -1, 1\}$ на первый взгляд не обладает никакой симметрией. Однако, перебрав все элементы симметрии цепочки в состоянии равновесия, можно обнаружить, что произведение $\hat{a}^2 \hat{i}$ является ее элементом симметрии. Действительно, последовательное применение сначала инверсии, а затем дважды трансляции оставляет вектор $\vec{\varphi}_3$ неизменным. Поскольку квадрат этого элемента равен единичному элементу ($\hat{a}^2 \hat{i} \hat{a}^2 \hat{i} = \hat{a}^2 \hat{a}^{-2} \hat{i} \hat{i} = \hat{e}$), и других элементов симметрии у моды $\nu_3(t) \vec{\varphi}_3$ нет, ясно, что ее группа симметрии также состоит из двух элементов: \hat{e} и $\hat{a}^2 \hat{i}$.

Мода $\nu_4(t) \vec{\varphi}_4$, соответствующая вектору $\vec{\varphi}_4 = \{-1, 1, -1, 1\}$, обладает инверсией и трансляцией на два межатомных расстояния. Полная группа симметрии этой моды включает два указанных элемента и все их произведения: $\hat{e}, \hat{a}^2, \hat{i}, \hat{a}^2 \hat{i}$.

Задание. Проверьте выполнение групповых аксиом для приведенного набора элементов симметрии нормальной моды $\nu_4(t) \vec{\varphi}_4$.

Таким образом, нормальные моды обладают некоторой симметрией, которая оказывается *ниже* симметрии цепочки в состоянии равновесия, а именно, элементы симметрии нормальных мод образуют некоторые *подгруппы* группы симметрии равновесного состояния цепочки.

В данном разделе мы получили два важных результата для нелинейной динамики систем с дискретной симметрией: рассматриваемая цепочка обладает определенной группой симметрии (которой характеризуются ее равновесная конфигурация и уравнения движения), а определенные *динамические режимы* – нормальные моды – обладают симметрией, соответствующей подгруппам этой группы.

5 УЧЕТ НЕЛИНЕЙНОСТИ МЕЖАТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

До сих пор мы ограничивались рассмотрением линейного приближения, в рамках которого получили ряд важных результатов. Учтем теперь в уравнениях движения и нелинейные (ангармонические) члены в разложении сил, действующих на атомы, в степенные ряды и посмотрим, к каким следствиям это приведет. Для простоты ограничимся лишь квадратичными слагаемыми, что соответствует цепочке ФПУ α -типа. Иными словами, силу, действующую на атом со стороны его ближайших соседей, будем полагать равной $F(\Delta x) = k\Delta x + \alpha(\Delta x)^2$. Тогда вместо линейной системы (3) мы должны получить следующую систему уравнений (как и ранее, используются периодические граничные условия):

$$\begin{aligned}\ddot{x}_1 &= x_4 - 2x_1 + x_2 + (x_2 - x_1)^2 - (x_1 - x_4)^2, \\ \ddot{x}_2 &= x_1 - 2x_2 + x_3 + (x_3 - x_2)^2 - (x_2 - x_1)^2, \\ \ddot{x}_3 &= x_2 - 2x_3 + x_4 + (x_4 - x_3)^2 - (x_3 - x_2)^2, \\ \ddot{x}_4 &= x_3 - 2x_4 + x_1 + (x_1 - x_4)^2 - (x_4 - x_3)^2.\end{aligned}\tag{29}$$

Задание. Получите систему уравнений (29). При этом выполните замену переменных вида $t = \gamma\tau$, $x_i = \eta\tilde{x}_i$, где величины γ и η определяются из того условия, что бы в преобразованную систему не входили коэффициенты k и α .

Переход в *линейной* системе (3) к нормальным модам привел к ее расщеплению на систему независимых уравнений. Получим теперь систему уравнений движения цепочки в терминах нормальных мод для *нелинейного* случая. Для этого в системе (29) проведем замену переменных (15), используя тот же метод, который был применен нами ранее для линейного случая. В результате из (29) должна получиться следующая система уравнений:

$$\begin{aligned}
\ddot{v}_1 &= 0, \\
\ddot{v}_2 + 2v_2 &= 8v_2v_4, \\
\ddot{v}_3 + 2v_3 &= -8v_3v_4, \\
\ddot{v}_4 + 4v_4 &= 4(v_2^2 - v_3^2).
\end{aligned}
\tag{30}$$

Задание. Используя математический пакет MAPLE, приведите замену переменных (15) в уравнениях (29) и получите систему уравнений (30).

Программа на языке MAPLE для выполнения задания:

```

> restart;
> N:=4;
> x[0](t):=x[N](t);x[N+1](t):=x[1](t);
> sys:=seq(diff(x[n](t),t$2)=-2*x[n](t)+x[n+1](t)+x[n-1](t)
+((x[n+1](t)-x[n](t))^2-(x[n](t)-x[n-1](t))^2),n=1..N);
> with(LinearAlgebra):
> Phi:=Matrix(4,4,[[1,-1,1,-1],[1,-1,-1,1],[1,1,-1,-1],[1,1,1,1]]);
> X:=Vector(N,[seq(x[i](t),i=1..N)]);
> M:=Vector(N,[seq(nu[i](t),i=1..N)]);
> s:=seq(X[n]=MatrixVectorMultiply(Phi,M)[n],n=1..N);
> s2:=Vector(N,[seq(rhs(sys[i]),i=1..N)]);
> s3:=MatrixVectorMultiply(Transpose(Phi),s2);
> sys2:=seq(diff(M[n],t$2)=simplify(subs(s,s3[n])/N),n=1..N);

```

Полученная система (30), в отличие от (3), является уже системой *связанных* уравнений. Это есть главное следствие учета нелинейности межатомных взаимодействий.

В отличие от линейного случая, для *нелинейных* систем уравнений нет *универсального* способа их решения. Мода $v_1(t)$, отвечающая за движение центра

масс системы, осталась независимой, поскольку по-прежнему отсутствуют возвращающие силы, действующие на цепочку как целое. В дальнейшем мы будем исключать ее из нашего исследования, всегда полагая $\nu_1(t) \equiv 0$, и рассматривая тем самым только *колебательные* динамические режимы.

Попытаемся теперь найти хотя бы какое-нибудь частное решение нелинейной системы (30). Попробуем положить $\nu_3 \equiv \nu_4 \equiv 0$, считая ненулевой только вторую моду ($\nu_2 \neq 0$). Это предположение вступает в противоречие с четвертым уравнением системы (30): оно не обращается в тождество. Фактически это означает, что, в процесс колебаний будет вовлечена и мода $\nu_4(t)$ за счет ее взаимодействия с модой $\nu_2(t)$. Третья же мода при этом может оставаться нулевой и, стало быть, в нашей цепочке может реализовываться динамический режим вида $\nu_1(t) \equiv 0$, $\nu_2 \neq 0$, $\nu_3(t) \equiv 0$ и $\nu_4 \neq 0$. Этот режим является *двухпараметрическим*, поскольку он характеризуется только двумя степенями свободы [$\nu_2(t)$ и $\nu_4(t)$]. Аналогично, возможен и другой двухпараметрический режим $\nu_1(t) \equiv 0$, $\nu_2 \equiv 0$, $\nu_3(t) \neq 0$ и $\nu_4 \neq 0$.

С другой стороны, если положить $\nu_2 \equiv 0$, $\nu_3(t) \equiv 0$, $\nu_4 \neq 0$, то второе и третье уравнения системы (30) удовлетворятся тождественным образом, а четвертое уравнение принимает вид:

$$\ddot{\nu}_4 + 4\nu_4 = 0. \quad (31)$$

Таким образом, в нелинейной системе (30) может реализовываться однопараметрический режим вида $\nu_1(t) \equiv 0$, $\nu_2 \equiv 0$, $\nu_3(t) \equiv 0$, $\nu_4 \neq 0$, причем, динамика переменной $\nu_4(t)$ описывается уравнением гармонического осциллятора (31). Все *точные* одно- и двухпараметрические режимы, которые могут реализовываться в цепочках Ферми-Пасты-Улама α - и β -типов, найдены и исследованы в работах [12, 13].

Подведем итоги. Несмотря на связанность системы нелинейных уравнений [например, типа (30)], в ней могут реализовываться динамические режимы, размерность которых меньше (а часто существенно меньше) полной размерности рассматриваемой системы. Такие режимы соответствуют так называемым *бушам* мод, которые были введены в работе [5]. Возвращаясь к симметричным аспектам нелинейной динамики, заметим, что как показано в этой работе, возбуждение в произвольной нелинейной системе некоторой моды, обладающей определенной симметрией, может привести к возбуждению только тех мод, симметрия которых *не ниже* симметрии этой первоначально возбужденной (корневой) моды. Полная совокупность мод, вовлекаемых в колебательный режим за счет возбуждения корневой моды, и называется бушем мод. Элементы теории бушей мод будут рассмотрены в последующих методических пособиях данной серии.

Задание. Рассмотрев симметрию мод $\nu_2(t)$, $\nu_3(t)$ и $\nu_4(t)$, которая определяется базисными векторами $\vec{\varphi}_2$, $\vec{\varphi}_3$ и $\vec{\varphi}_4$, убедитесь в том, что возбуждение может передаваться от данной моды лишь к модам, симметрия которых не ниже ее собственной симметрии.

Список литературы

- 1 Бир, Г. Л. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках [Текст]: монография / Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус. - М.: Наука, 1972. - 584 с.
- 2 Эллиот, Дж. Симметрия в физике [Текст]: монография в 2 т. / Дж. Эллиот, П. Добер. - М.: Мир, 1983. - 780 с.
- 3 Хамермеш, М. Теория групп и ее применение к физическим проблемам [Текст]: монография / М. Хамермеш. - М.: Мир, 1966. - 587 с.

- 4 Петрошень, М. И. Применение теории групп в квантовой механике [Текст]: монография / М. И. Петрошень, Е. А. Трифонов. - М.: Наука, 1967. - 308 с.
- 5 Сахненко, В. П. Симметричные правила отбора в нелинейной динамике атомных систем [Текст] / В. П. Сахненко, Г. М. Чечин // ДАН. - 1993. - Т. 330. - №3. - С. 308-310.
- 6 Сахненко, В. П. Кусты мод и нормальные колебания для нелинейных динамических систем с дискретной симметрией [Текст] / В. П. Сахненко, Г. М. Чечин // ДАН. - 1994. - Т. 338. - №1. - С. 42-45.
- 7 Chechin, G. M. Interactions between Normal Modes in Nonlinear Dynamical Systems with Discrete Symmetry. Exact Results [Текст] / G. M. Chechin, V. P. Sakhnenko. // Physica D. - 1998. - V. 117. - P. 43-76.
- 8 Пойа, Д. Как решать задачу [Текст]: монография / Д. Пойа. - Учпедгиз, 1959. - 207 с.
- 9 Калиткин, Н. Н. Численные методы [Текст]: учеб. для вузов / Н. Н. Калиткин. - М.: Наука, 1978.
- 10 Чечин, Г. М. Собственные значения и собственные векторы матриц [Текст]: метод. указания / Г. М. Чечин, М. Ю. Зехцер. - Ростов-на-Дону: Изд-во Ростовского гос. ун-та, 2006. - 36 с.
- 11 Сиротин, Ю. И. Основы кристаллофизики [Текст]: монография / Ю. И. Сиротин, М. П. Шаскольская. - М.: Наука, 1975. - 680 с.
- 12 Chechin, G. M. Bushes of Vibrational Modes for Fermi-Pasta-Ulam Chains [Текст] / G. M. Chechin, N. V. Novikova, A. A. Abramenko. // Physica D. - 2002. - V. 166. - P. 208-238.
- 13 Chechin, G. M. Stability of low-dimensional bushes of vibrational modes in the Fermi-Pasta-Ulam chains [Текст] / G. M. Chechin, D. S. Ryabov, K. G. Zhukov. // Physica D. - 2005. - V. 203. - P. 121-166.