



## ТЕОРЕТИКО-ГРУППОВЫЕ МЕТОДЫ ПРИ АНАЛИЗЕ УСТОЙЧИВОСТИ ДИНАМИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ В НЕЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМАХ С ДИСКРЕТНОЙ СИММЕТРИЕЙ

*К.Г. Жуков, Г.М. Чечин*

В настоящей работе подробно описан разработанный авторами теоретико-групповой метод, который позволяет в ряде случаев существенным образом упростить исследование устойчивости динамических режимов в нелинейных физических системах с дискретной симметрией. Суть метода состоит в расщеплении линеаризованной в окрестности данного режима исходной нелинейной системы дифференциальных уравнений на некоторое число независимых подсистем малой размерности. Применение метода иллюстрируется на примере анализа устойчивости нескольких колебательных режимов в простой октаэдрической структуре.

### Введение

Исследование устойчивости динамических режимов в нелинейных системах представляет собой достаточно сложную задачу. Это особенно ощутимо в тех случаях, когда изучаемая система описывается большим числом степеней свободы, а рассматриваемый динамический режим не является периодическим.

Стандартный подход к исследованию устойчивости предполагает линеаризацию исходной системы в окрестности данного динамического режима и дальнейший анализ устойчивости нулевого решения полученной системы линейных дифференциальных уравнений с переменными во времени коэффициентами. В работе [1] нами был предложен теоретико-групповой метод упрощения анализа устойчивости динамических режимов в произвольных системах (консервативных и диссипативных) с дискретной симметрией, который в ряде случаев позволяет существенным образом упростить анализ устойчивости за счет *расщепления* вышеупомянутой линеаризованной системы на отдельные *независимые подсистемы* малой размерности.

В настоящей работе рассмотрено применение этого метода для анализа устойчивости трех различных колебательных режимов в нелинейной октаэдрической системе. Изложению развиваемого теоретико-группового подхода предпослано описание некоторых понятий, идей и результатов теории нелинейных динамических систем с дискретной симметрией (более подробное их рассмотрение можно найти в предыдущих работах [2–5]).

## 1. Симметрия нормальных мод

Все возможные динамические режимы в нелинейной системе с дискретной группой симметрии  $G$  можно классифицировать по ее подгруппам  $G_j \subseteq G$  [2, 4]. В качестве группы  $G$  может фигурировать группа симметрии равновесной конфигурации системы, группа симметрии ее гамильтониана (для гамильтоновых систем) или группа симметрии описывающих данную систему динамических уравнений.

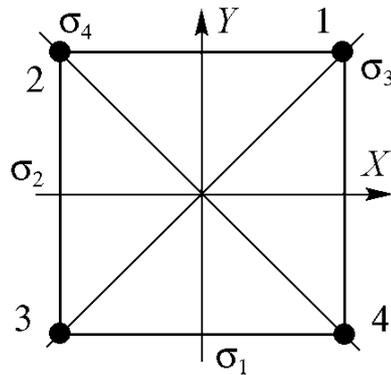


Рис. 1. Механическая модель плоской четырехатомной молекулы

В разделах 1 и 2 вышесказанное иллюстрируется на простейшем примере. Рассмотрим механическую модель плоской четырехатомной молекулы, равновесная конфигурация которой представляет собой изображенный на рис. 1 квадрат. Эта равновесная конфигурация атомов, расположенных в узлах квадрата, обладает группой симметрии  $G = C_{4v}$ . Здесь и далее мы будем использовать обозначения точечных групп симметрии по Шенфлису (см., например, [6]). Эта группа состоит из восьми элементов симметрии. В нее входят повороты на углы  $0^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $180^\circ$ ,  $270^\circ$  вокруг оси  $Z$ , проходящей через центр квадрата и перпендикулярной к плоскости рисунка, и четыре плоскости зеркального отражения ( $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$ ,  $\sigma_3$ ,  $\sigma_4$ ), которые также перпендикулярны плоскости рисунка и проходят через центр квадрата.

Зная силы взаимодействия между атомами нашей модельной молекулы<sup>1</sup>, можно с помощью гармонического приближения, предлагаемого теорией малых колебаний механических систем (см., например, [7]), построить систему линейных нормальных мод (нормальных колебаний).

Будем далее рассматривать колебания атомов около своих положений равновесия лишь в плоскости  $XY$ . Таким образом, динамика исследуемой механической системы описывается восемью степенями свободы, и, стало быть, имеем восемь нормальных мод.

Каждая из нормальных мод описывает некоторый колебательный режим молекулы и обладает определенной *группой симметрии*. На рис. 2 стрелками показаны атомные смещения в некоторый момент времени, которые соответствуют четырем из этих нормальных мод. Заметим, что в пределах каждой конфигурации длины стрелок, то есть величины атомных смещений *одинаковы*.

В любой момент времени конфигурация атомов, соответствующая первой нормальной моде (рис. 2, *а*), представляет собой квадрат, причем ребро этого квадрата осциллирует во времени. Атомная конфигурация, отвечающая второй моде (рис. 2, *б*), представляет собой ромб, который в процессе колебаний вытягивается то вдоль одной, то вдоль другой своей диагонали. Третья нормальная мода (рис. 2, *в*), описывает

<sup>1</sup>Например, они могут характеризоваться парным центральным потенциалом типа Леннарда-Джонса или Морзе.

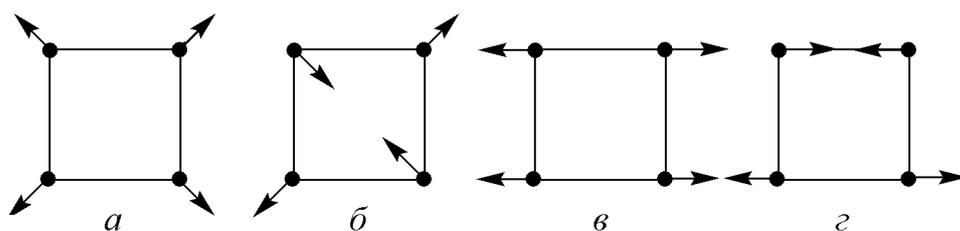


Рис. 2. Некоторые нормальные моды квадратной молекулы: *a* – квадрат, *b* – ромб, *v* – прямоугольник, *z* – трапеция

колебательный режим, соответствующий *прямоугольной* атомной конфигурации (в процессе колебаний этот прямоугольник вытягивается попеременно вдоль осей  $X$  и  $Y$ ), а четвертой моде (рис. 2, *z*) отвечает мгновенная атомная конфигурация в форме трапеции.

Существенно, что каждая из нормальных мод обладает некоторой группой симметрии, которая является *подгруппой*  $G_j$  группы симметрии  $G = C_{4v}$  равновесной конфигурации рассматриваемой четырехатомной молекулы. Действительно, произвольные *малые* смещения атомов из положения равновесия в вершинах квадрата на рис. 1 приводят к исчезновению, по крайней мере, одного из элементов симметрии этой квадратной конфигурации, и только смещения, указанные на рис. 2, *a*, не приводят к понижению симметрии колебательного состояния ( $G_1 = G = C_{4v}$ ). Например, симметрия колебательного состояния на рис. 2, *b*, отвечающая ромбической конфигурации, имеет симметрию  $G_2 = C_{2v}^d$ . Последняя группа симметрии состоит из четырех элементов: поворотов на  $0^\circ$  и  $180^\circ$  вокруг оси  $Z$  и отражений в двух зеркальных плоскостях, которые проходят через диагонали ромба. Таким образом, при переходе от группы симметрии равновесной конфигурации  $G = C_{4v}$  к ромбической колебательной конфигурации (см. рис. 2, *b*) исчезают повороты на  $90^\circ$ ,  $270^\circ$ , а также отражения в «координатных» зеркальных плоскостях (то есть в плоскостях, перпендикулярных координатным осям  $X$  и  $Y$ ).

Аналогично, прямоугольной конфигурации колебательного состояния нашей молекулы (см. рис. 2, *v*) также отвечает группа симметрии  $C_{2v}$ , но в нее, наряду с поворотами на  $0^\circ$  и  $180^\circ$ , входят *другие* плоскости отражения, а именно, те, которые проходят через координатные оси. Для того, чтобы различать эти две разные подгруппы введем дополнительный верхний индекс  $d$  или  $c$ , который определяет, является ли «установка» рассматриваемой подгруппы в исходной группе симметрии  $G = C_{4v}$  диагональной или координатной. Иными словами, этот индекс определяет, какие плоскости зеркального отражения входят в группу  $C_{2v}$  – проходящие через координатные оси или проходящие через диагонали ромба. Итак, нормальным модам на рис. 2, *b* и *v* отвечают группы симметрии  $G_2 = C_{2v}^d$  и  $G_3 = C_{2v}^c$ , соответственно.

Наконец, четвертой моде (см. рис. 2, *z*) отвечает группа симметрии  $G_4 = C_s$ , которая также является подгруппой исходной группы симметрии  $G = C_{4v}$  и содержит кроме тождественного элемента симметрии лишь отражение в плоскости, перпендикулярной оси  $X$ .

Итак, каждой нормальной моде отвечает вполне определенная группа точечной симметрии  $G_j$ , которая является подгруппой группы симметрии  $G = C_{4v}$  рассматриваемой молекулы в состоянии равновесия.

Заметим, что приведенные на рис. 2 картинки атомных смещений для нормальных мод в системах с *разными* законами межчастичного взаимодействия (потенциал Леннарда–Джонса, Морзе и др.) оказываются *одинаковыми*. Этот факт связан с тем, что в нашем случае нормальные координаты являются одновременно и *симметрическими*, то есть *базисными векторами неприводимых представлений* группы симметрии  $G = C_{4v}$  (см. далее).

Нахождение нормальных координат в сложных молекулярных и кристаллических структурах обычно проводят в два этапа. На первом этапе с помощью теоретико-групповых методов находят симметрические координаты, в результате чего матрица силовых постоянных, фигурирующая в теории малых колебаний механических систем, приводится к некоторому блочно-диагональному виду, который определяется рассматриваемой в разделе 3 теоремой Вигнера. На этом этапе исследования знание конкретного закона межатомного взаимодействия не требуется. На втором этапе нужно привести к диагональному виду каждый из вышеупомянутых блоков, для чего уже необходимо знание силовых постоянных (то есть этот этап вычислений существенным образом зависит от закона межатомного взаимодействия). На этом этапе мы переходим от симметрических координат к нормальным координатам.

В заключение заметим, что симметрия *колебательного состояния* ( $G_j$ ) *сохраняется* во времени в том смысле, что если в данный момент рассматриваемое состояние обладало некоторым элементом симметрии, то этот элемент *не может* спонтанно исчезнуть. Приведенное утверждение является прямым следствием принципа *классического детерминизма*. Однако следует иметь в виду, что *потеря* колебательным режимом *устойчивости* обычно влечет за собой спонтанное понижение его симметрии.

## 2. Буши колебательных мод

В *линейных* динамических системах, которые отвечают гармоническому приближению, нормальные моды являются независимыми друг от друга. В нелинейной же системе между обычными нормальными модами имеются определенные взаимодействия, в результате чего они перестают быть точными решениями соответствующих динамических уравнений. Тем не менее, оказывается, что в нелинейных системах могут существовать некоторые их аналоги.

Попытаемся, например, возбудить колебательный режим типа «а» (см. рис. 2) в исходной *нелинейной* динамической системе с помощью задания соответствующих начальных условий: все атомы отклоняются в начальный момент времени  $t = t_0$  вдоль диагоналей квадрата на одинаковые расстояния из своих положений равновесия, а их начальные скорости полагаются равными нулю. Можно показать, что такой режим (ему отвечает группа симметрии  $G_1 = C_{4v}$ ) будет существовать бесконечно долго и в нелинейной системе, но временная зависимость отклонений атомов молекулы из своих положений равновесия, оставаясь периодической, уже не будет синусоидальной, как это имеет место в случае линейных нормальных мод. Такой колебательный режим представляет собой *нелинейную нормальную моду* Розенберга<sup>2</sup> [8, 9].

<sup>2</sup>Сам Розенберг называет такие динамические режимы «similar nonlinear normal modes».

Любой динамический режим, возникающий в рассматриваемой нами нелинейной системе, можно описать с помощью задания восьмимерного «конфигурационного вектора»

$$\mathbf{X}(t) = \{x_1(t), y_1(t) | x_2(t), y_2(t) | x_3(t), y_3(t) | x_4(t), y_4(t)\},$$

где  $x_i(t)$  и  $y_i(t)$  суть смещения  $i$ -го атома вдоль координатных осей  $X$  и  $Y$ , соответственно. Поскольку нормальные координаты  $\{\phi_j | j = 1, \dots, 8\}$  образуют базис в восьмимерном пространстве всех возможных атомных смещений, конфигурационный вектор  $\mathbf{X}(t)$  можно разложить по этому базису

$$\mathbf{X}(t) = \sum_{j=1}^8 \mu_j(t) \phi_j. \quad (1)$$

Явный вид базисных векторов  $\phi_j$  легко восстановить по рисункам типа «а»–«в» (см. рис. 2), например,

$$\phi_1 = \{ \quad 1, \quad 1 \quad | \quad -1, \quad 1 \quad | \quad -1, \quad -1 \quad | \quad 1, \quad -1 \},$$

$$\phi_2 = \{ \quad 1, \quad 1 \quad | \quad 1, \quad -1 \quad | \quad -1, \quad -1 \quad | \quad -1, \quad 1 \},$$

$$\phi_3 = \{ \quad 1, \quad 0 \quad | \quad -1, \quad 0 \quad | \quad -1, \quad 0 \quad | \quad 1, \quad 0 \},$$

$$\phi_4 = \{ \quad -1, \quad 0 \quad | \quad 1, \quad 0 \quad | \quad -1, \quad 0 \quad | \quad 1, \quad 0 \},$$

и т. д.

Если возбудить колебательный режим  $\mathbf{X}(t)$  с помощью начальных условий  $\mathbf{X}(t_0) = \phi_1$ ,  $\dot{\mathbf{X}}(t_0) = 0$ , то в разложении (1) справа останется только одно слагаемое

$$\mathbf{X}(t) = \mu_1(t) \phi_1, \quad (2)$$

где  $\mu_1(t)$  удовлетворяет некоторому дифференциальному уравнению второго порядка (отличному от уравнения для гармонического осциллятора), которое можно получить, зная явный вид межчастичных взаимодействий в рассматриваемой нами системе.

Если же возбудить «ромбический» колебательный режим с помощью начальных условий  $\mathbf{X}(t_0) = \phi_2$ ,  $\dot{\mathbf{X}}(t_0) = 0$ , то можно показать, что в разложении (1) останется два члена

$$\mathbf{X}(t) = \mu_1(t) \phi_1 + \mu_2(t) \phi_2. \quad (3)$$

В первом случае (см. формулу (2)) возникающий динамический режим  $\mathbf{X}(t)$  представляет собой нелинейную нормальную моду Розенберга, а во втором случае (см. формулу (3)) – *двумерный буш* (куст), состоящий из двух колебательных мод [2, 4]. Последний результат означает, что возбуждение от первоначально возбужденной в нелинейной системе второй нормальной моды (в любой момент времени она пропорциональна вектору  $\phi_2$ ) может передаваться *только* первой моде (пропорциональной вектору  $\phi_1$ ), но не другим колебательным модам. В работе [2], где нами было введено понятие бушей мод, с помощью теоретико-групповых методов доказывается, что возбуждение от колебательной моды  $\mu_j(t) \phi_j$  с группой симметрии  $G_j$

может передаваться только тем модам, симметрия которых *не ниже* симметрии исходно возбужденной моды. Таким образом, в нелинейных системах с дискретной симметрией существуют определенные теоретико-групповые *правила отбора* для передачи возбуждения между модами различной симметрии. Эти правила отбора могут существенным образом ограничить *размерность* динамического режима, то есть число характеризующих его независимых степеней свободы. Таким образом, размерность динамического режима  $\mathbf{X}(t)$  определяется *числом слагаемых* в правой части формулы (1), а функции  $\mu_j(t)$  являются новыми динамическими переменными рассматриваемой нами системы. Коллективные переменные  $\mu_j(t)\phi_j$  мы для краткости будем называть *колебательными модами*.

Для наших дальнейших целей более удобно делать разложения типа (1) не по нормальным координатам (нахождение которых предполагает, вообще говоря, знание сил взаимодействия между частицами системы), а по *симметрическим* координатам, которые являются базисными векторами неприводимых представлений соответствующих групп симметрии (см. далее). Дело в том, что симметрические координаты (мы будем их также обозначать символами  $\phi_j$ ) можно построить, исходя из чисто симметричных соображений, то есть без знания явного вида взаимодействия между элементами нашей динамической системы.

Полный комплект независимых колебательных мод, определяющих данный динамический режим, называется *бушем* (кустом) мод [2, 4]. Состав буша мод, то есть совокупность тех  $m$  мод, которые дают в него вклад в разложении типа (1), можно найти с помощью соответствующих теоретико-групповых методов без знания характера межчастичного взаимодействия. Это – «геометрический аспект» буша мод.

С другой стороны, *динамика*  $m$ -мерного буша определяется  $m$  дифференциальными уравнениями второго порядка, вид которых уже существенным образом зависит от вышеупомянутого характера межчастичных взаимодействий. Например, ромбический динамический режим в рассматриваемой нами квадратной молекуле имеет вид

$$\mathbf{X}(t) = \{a, a \mid -b, b \mid -a, -a \mid b, -b\}, \quad (4)$$

где введены обозначения  $a = \mu_1(t) + \mu_2(t)$  и  $b = \mu_1(t) - \mu_2(t)$ , а зависящие от времени функции  $\mu_1(t)$  и  $\mu_2(t)$  определяются дифференциальными уравнениями вида

$$\begin{aligned} \ddot{\mu}_1(t) &= F_1(\mu_1(t), \mu_2(t)), \\ \ddot{\mu}_2(t) &= F_2(\mu_1(t), \mu_2(t)). \end{aligned}$$

Явный вид такого типа уравнений будет обсужден далее на примере октаэдрической молекулы с потенциалом взаимодействия Леннарда–Джонса (см. раздел 4 настоящей работы).

Заметим, что, с позиций теории бушей мод, нелинейные нормальные моды Розенберга являются *одномерными* бушами мод.

Существенно, что во многих  $N$ -частичных механических системах могут существовать буши мод достаточно малой размерности: одномерные, двумерные, трехмерные, четырехмерные и т. д. [2–4, 10–13].

Дадим следующее строгое математическое определение. Буши мод представляют собой *инвариантные многообразия* рассматриваемой динамической системы,

разложенные по базисным векторам неприводимых представлений группы симметрии этой системы<sup>3</sup>.

Подробное изложение теории бушей мод можно найти в наших предыдущих работах, в частности, в [4].

Из формулы (1) очевидно, что каждый буш мод характеризуется некоторой группой симметрии, которая является *пересечением* групп симметрии всех входящих в него мод. В свою очередь, эти группы симметрии являются *подгруппами* группы симметрии исходной нелинейной динамической системы.

Подведем итоги всего вышесказанного.

Динамические режимы в нелинейной системе, характеризующейся группой симметрии  $G$ , можно классифицировать по ее подгруппам  $G_j$  ( $G_j \in G$ ). Таким образом, каждый динамический режим обладает некоторой группой симметрии  $G_j$ . В частности, могут быть и такие режимы, которым соответствует лишь тривиальная группа симметрии (состоящая только из единичного элемента) – это есть случай «отсутствия всякой симметрии». Каждый из таких режимов (бушей мод) имеет вполне определенную размерность – число независимых степеней свободы, которое может быть определено с помощью теоретико-групповых методов.

### 3. Проблема устойчивости бушей мод

Поскольку понятие устойчивости является весьма разноплановым, необходимо точно определить, что мы понимаем под этим термином, говоря об устойчивости бушей мод.

Пусть в начальный момент времени  $t = t_0$  в механической системе был возбужден некоторый  $m$ -мерный буш мод с группой симметрии  $G_j$ . При малых амплитудах входящих в него мод он может быть устойчивым динамическим объектом, в том смысле, что с течением времени сохраняется его размерность ( $m$ ) и группа симметрии ( $G_j$ ) (при этом, разумеется, соответствующие ему динамические переменные  $\mu_j(t)$  эволюционируют во времени). При увеличении амплитуд мод буша, которые мы определяем с помощью задания некоторых начальных условий, он может потерять устойчивость: при  $t > t_0$  число входящих в него мод (то есть размерность буша) может *увеличиться*, и, как следствие этого явления, происходит спонтанное понижение симметрии колебательного состояния рассматриваемой системы.

Будучи *точным* нелинейным возбуждением, каждый буш имеет свою собственную область устойчивости в пространстве всех возможных амплитуд его мод и их скоростей. Вне области устойчивости имеет место явление, аналогичное параметрическому резонансу (более подробно см. [4]), которое и приводит к потере его устойчивости и возникновению в системе *нового буша* большей размерности с группой симметрии  $G_k$  ( $k \neq j$ ), которая является подгруппой группы симметрии  $G_j$  исходного буша ( $G_k \in G_j$ ).

В настоящей работе будем рассматривать устойчивость динамических режимов в консервативных механических системах, динамика которых описывается  $N$

---

<sup>3</sup>Такое разложение имеет вполне определенный физический смысл, поскольку разным неприводимым представлениям отвечают, вообще говоря, разные физические характеристики рассматриваемой системы (см. [6]).

автономными дифференциальными уравнениями вида

$$\ddot{\mathbf{X}} = \mathbf{F}(\mathbf{X}). \quad (5)$$

Здесь  $\mathbf{X} = \{x_1(t), x_2(t), \dots, x_N(t)\}$  есть конфигурационный вектор, компоненты которого задают отклонения частиц из своих положений равновесия (равновесному состоянию отвечает вектор  $\mathbf{X} = 0$ ), а вектор-функция  $\mathbf{F}(\mathbf{X}) = \{f_1(\mathbf{X}), f_2(\mathbf{X}), \dots, f_N(\mathbf{X})\}$  определяет правые части рассматриваемых уравнений движения.

Пусть  $G_0$  есть группа таких преобразований ( $g$ )  $N$ -мерного пространства, которые оставляют систему уравнений (5) инвариантной. Это условие инвариантности может быть записано в виде  $\mathbf{F}(g\mathbf{X}) = g\mathbf{F}(\mathbf{X})$  (см., например, [1]). Иными словами, в результате преобразования

$$\tilde{\mathbf{X}} = g\mathbf{X} \quad (g \in G_0) \quad (6)$$

система уравнений (5) в новых переменных  $\{\tilde{x}_1(t), \dots, \tilde{x}_N(t)\}$  будет эквивалентна исходной (например, преобразование (6) может привести просто к перестановке отдельных уравнений системы (5)).

Динамический режим  $\mathbf{X}(t)$ , подлежащий исследованию на устойчивость, будем определять  $N$ -мерным вектором  $\mathbf{C}(t)$ , зависящим лишь от  $m$  независимых функций времени. Этот вектор определяет *инвариантное многообразие* рассматриваемой динамической системы, и может быть найден из решения системы линейных алгебраических уравнений вида

$$g\mathbf{X} = \mathbf{X} \quad \forall g \in G, \quad (7)$$

где группа симметрии  $G$  данного динамического режима является *подгруппой* группы симметрии  $G_0$  системы уравнений движения (5). Таким образом,  $\mathbf{C}(t)$  получается из произвольного конфигурационного вектора  $\mathbf{X}(t)$  в результате *наложения симметричных ограничений* (7), что приводит к определенной *функциональной связи* между его компонентами (см., например, формулу (4), где приведен восьмимерный вектор  $\mathbf{X}(t) \equiv \mathbf{C}(t)$ , зависящий лишь от двух произвольных функций времени  $a(t)$  и  $b(t)$ ).

Согласно известной схеме исследования локальной устойчивости, линеаризуем исходную систему динамических уравнений (5) в окрестности рассматриваемого нами динамического режима (буша мод). Для этого положим

$$\mathbf{X}(t) = \mathbf{C}(t) + \boldsymbol{\delta}(t), \quad (8)$$

где  $\boldsymbol{\delta}(t)$  – инфинитезимальный конфигурационный вектор, и сохраним после подстановки (8) в уравнение (5) лишь линейные по компонентам вектора  $\boldsymbol{\delta}(t)$  члены. В результате получим систему  $N$  линейных дифференциальных уравнений

$$\ddot{\boldsymbol{\delta}} = \mathbf{J}[\mathbf{C}(t)] \cdot \boldsymbol{\delta}, \quad (9)$$

где  $\mathbf{J}[\mathbf{C}(t)]$  есть матрица Якоби системы (5)

$$\mathbf{J}[\mathbf{C}(t)] = \left\| \left. \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{X}(t)=\mathbf{C}(t)} \right\|.$$

Подчеркнем, что элементы этой матрицы (коэффициенты системы (9)) являются функциями времени и определяются видом исследуемого динамического режима  $\mathbf{C}(t)$ . Для краткости будем в дальнейшем называть систему уравнений (9) «линеаризованной системой».

Основным результатом работы [1] является разработка теоретико-группового метода, с помощью которого систему  $N$  связанных линеаризованных уравнений (9) можно *расцепить* на некоторое число *независимых подсистем* меньшей размерности, что может существенным образом упростить анализ устойчивости рассматриваемого динамического режима. Этот подход основан на доказанной нами в работе [1] теореме о симметрии линеаризованной системы (9):

**Теорема 1.** *Матрица  $J[\mathbf{C}(t)]$  системы дифференциальных уравнений, линеаризованных в окрестности буша мод  $V[G]$ , определяемого конфигурационным вектором  $\mathbf{C}(t)$ , коммутирует со всеми матрицами  $M(g)$  ( $g \in G$ ) механического представления группы симметрии  $G$  рассматриваемого буша:*

$$M(g) \cdot J[\mathbf{C}(t)] = J[\mathbf{C}(t)] \cdot M(g). \quad (10)$$

Напомним, что механическим называется представление, построенное на некотором базисе  $\{\mathbf{e}_i \mid i = 1, \dots, N\}$  конфигурационного пространства (пространства всех возможных атомных смещений). Обычно базисные векторы такого базиса удобно выбирать в форме последовательных векторов-столбцов единичной  $N$ -мерной матрицы, то есть у вектора  $\mathbf{e}_i$  отличной от нуля является только одна компонента, которая стоит на  $i$ -ом месте и равна единице.

Поскольку набор векторов  $\{\mathbf{e}_i \mid i = 1, \dots, N\}$  образует базис, вектор  $g\mathbf{e}_i$  можно представить в виде определенной линейной комбинации векторов  $\mathbf{e}_j$ . Совокупность всех коэффициентов такой линейной комбинации образует некоторую матрицу, в силу чего имеем

$$g\mathbf{e}_i = \sum_{j=1}^N M_{ji}(g) \cdot \mathbf{e}_j \quad (i = 1, \dots, N).$$

Тогда, в соответствии со стандартным определением представления группы, элементу симметрии  $g \in G$  можно сопоставить квадратную матрицу  $M(g) = \|M_{ij}(g)\|$  (см., например, [14]). Полная совокупность матриц  $M(g)$  ( $\forall g \in G$ ) и образует механическое представление группы  $G$ .

Теорема 1 открывает возможность применения теоремы Вигнера [15] для приведения матрицы Якоби  $J[\mathbf{C}(t)]$  к вполне определенному блочно-диагональному виду. Ниже эта теорема приведена в той формулировке, которая является наиболее удобной для наших дальнейших целей.

Пусть имеется приводимое представление  $\Gamma$  группы  $G$ , которое может быть разложено на неприводимые представления (НП)  $\Gamma_j$  этой группы

$$\Gamma = \sum_j^{\oplus} m_j \Gamma_j. \quad (11)$$

Здесь  $m_j$  есть число раз, которое НП  $\Gamma_j$  входит в прямую сумму (11). Обозначая через  $n_j$  размерность неприводимого представления  $\Gamma_j$ , можем сформулировать теорему Вигнера следующим образом.

**Теорема 2 (теорема Вигнера).** Любая матрица  $H$ , коммутирующая со всеми матрицами представления  $\Gamma$  группы  $G$ , может быть определенным унитарным преобразованием приведена к блочно-диагональной форме

$$H = \sum^{\oplus} D_j, \quad (12)$$

такой, что

- размерность каждого блока  $D_j$  равна произведению  $m_j \cdot n_j$ ;
- блок  $D_j$  состоит из подблоков, представляющих собой матрицы, пропорциональные единичной матрице  $I_{n_j}$  размерности  $n_j$ , которые  $m_j$  раз повторяются вдоль строк и столбцов блока  $D_j$ .

Таким образом, блок  $D_j = D$ , характеризуемый числами  $n_j = n$  и  $m_j = m$ , имеет следующий вид

$$D = \begin{pmatrix} \mu_{11}I_n & \mu_{12}I_n & \dots & \mu_{1m}I_n \\ \mu_{21}I_n & \mu_{22}I_n & \dots & \mu_{2m}I_n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mu_{m1}I_n & \mu_{m2}I_n & \dots & \mu_{mm}I_n \end{pmatrix}, \quad (13)$$

где  $\mu_{ij}$  суть некоторые скалярные величины.

Применим теперь теорему Вигнера к задаче о расщеплении обсуждаемой нами системы (9) линеаризованных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами, которую для краткости будем далее записывать в виде  $\ddot{\delta} = J(t) \cdot \delta$ , где  $J(t) \equiv J[C(t)]$ . Для этого достаточно считать, что фигурирующая в теореме Вигнера матрица  $H$  есть матрица Якоби  $J(t)$ , а (приводимое) представление  $\Gamma$  является механическим представлением группы  $G$  того буша мод (динамического режима), в окрестности которого была проведена линеаризация исходной системы дифференциальных уравнений (5).

Для того чтобы осуществить вышеуказанное расщепление системы  $\ddot{\delta} = J(t) \cdot \delta$  необходимо сделать переход от выбранного ранее базиса  $\Phi = \{e_1, e_2, \dots, e_N\}$  к новому базису  $\Phi_{\text{нов}} = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$ , орты которого суть *базисные векторы неприводимых представлений* группы  $G$ . Пусть нам известна унитарная матрица  $S$ , осуществляющая переход от старого базиса к новому в соответствии с формулой  $\Phi_{\text{нов}} = S \cdot \Phi$ . Тогда унитарное преобразование

$$J_{\text{нов}}(t) = S^+ \cdot J(t) \cdot S \quad (14)$$

приводит матрицу  $J(t)$  к блочно-диагональной форме, определяемой теоремой Вигнера, а исследуемая линеаризованная система приобретает вид  $\ddot{\delta}_{\text{нов}} = J_{\text{нов}}(t) \cdot \delta_{\text{нов}}$ , где  $\delta_{\text{нов}} = S^+ \cdot \delta$ .

Исследование устойчивости буша мод теперь сводится к анализу устойчивости нулевых решений тех *независимых* подсистем, на которые была расщеплена система  $\ddot{\delta} = J(t) \cdot \delta$ .

Согласно теореме Вигнера, с каждым НП  $\Gamma_j$  размерности  $n_j$ , которое входит в состав механического представления  $m_j$  раз, связан блок  $D_j$  размерности  $n_j m_j$  в матрице  $J_{\text{нов}}(t)$  преобразованной линеаризованной системы. С другой стороны, из структуры (13) этого блока, которая опять же определяется теоремой Вигнера, видно,

что система  $n_j m_j$  линеаризованных уравнений, связанных с НП  $\Gamma_j$ , расщепляется на  $n_j$  одинаковых подсистем, состоящих из  $m_j$  уравнений каждая.

Очевидно, наибольшее упрощение линеаризованной системы получается в том случае, когда данное НП  $\Gamma_j$  входит в состав механического представления один раз ( $m_j = 1$ ). В этом случае блок  $D_j$  становится *диагональным*, и, как следствие, неприводимому представлению  $\Gamma_j$  отвечают  $n_j$  *независимых*, причем, *одинаковых* уравнений вида

$$\ddot{\delta}_k = \gamma(t) \cdot \delta_k \quad (k = 1 \dots n_j), \quad (15)$$

где  $\gamma(t)$  – соответствующий элемент диагональной матрицы  $J_{\text{нов}}(t)$ .

Если же, например, некоторое трехмерное ( $n_j = 3$ ) НП входит в механическое представление дважды ( $m_j = 2$ ), ему отвечают три линейные подсистемы, каждая из которых содержит по два уравнения, причем все эти подсистемы имеют одну и ту же зависящую от времени двумерную матрицу.

Явное расщепление исходной линеаризованной системы  $\ddot{\delta} = J(t) \cdot \delta$  на независимые подсистемы может оказаться весьма трудоемкой процедурой, связанной с построением базисных векторов неприводимых представлений группы симметрии исследуемого на устойчивость буша мод. Можно, однако, предложить достаточно простую процедуру построения «схемы расщепления» [1], используя лишь *теорию характеров* неприводимых представлений конечных групп. Говоря о построении схемы расщепления, мы имеем ввиду определение, на какое количество независимых подсистем и каких именно размерностей может быть расщеплена исходная линеаризованная система. Для нахождения такой схемы необходимо для каждого НП  $\Gamma_j$  размерности  $n_j$  определить кратность его вхождения  $m_j$  в механическое представление группы симметрии данного буша.

В разных учебных пособиях (см., например, [14]) и справочниках для всех точечных групп симметрии можно найти списки неприводимых представлений, их размерности и характеры<sup>4</sup>. В вышеупомянутой теории характеров хорошо известна формула

$$m_j = \frac{1}{\|G\|} \sum_{g \in G} \chi_{\Gamma}(g) \bar{\chi}_j(g), \quad (16)$$

которая определяет кратность вхождения  $m_j$  НП  $\Gamma_j$  в приводимое представление  $\Gamma$  группы  $G$ . Здесь  $\|G\|$  есть порядок конечной группы  $G$  (число ее элементов), а  $\chi_{\Gamma}(g)$  и  $\chi_j(g)$  суть следы матриц приводимого представления  $\Gamma$  и неприводимого представления  $\Gamma_j$ , которые соответствуют элементу  $g \in G$ . Черта над следом  $\chi_j(g)$  означает операцию комплексного сопряжения. В нашем случае в качестве приводимого представления  $\Gamma$  выступает механическое представление группы симметрии рассматриваемого буша мод.

Как уже отмечалось,  $\chi_j(g)$  для всех НП  $\Gamma_j$  групп точечной симметрии можно найти в справочной литературе. С другой стороны, следы  $\chi_{\Gamma}(g)$  матриц механического представления  $\Gamma$ , которые существенным образом зависят от структуры исследуемой механической системы, можно вычислить, не прибегая к явному нахождению самих этих матриц. Такая процедура описана, например, в [16] в связи с задачей о симметричной классификации малых колебаний многоатомных молекул. Главная

<sup>4</sup>Напомним, что характером представления называется вектор, образованный из следов всех матриц данного представления.

идея заключается в том, что для данного элемента  $g \in G$  вклад в  $\chi_\Gamma(g)$  дают только те атомы, положения которых не изменяются под действием этого элемента симметрии. При этом, если  $g$  определяет поворот на угол  $\phi$  вокруг некоторой оси, то каждый лежащий на ней атом дает вклад в  $\chi_\Gamma(g)$  равный  $(1 + 2 \cos(\phi))$ , в то время как для зеркального поворота аналогичный вклад равен  $(-1 + 2 \cos(\phi))$ .

Чтобы построить искомую схему расщепления, для каждого НП  $\Gamma_j$  достаточно знать два числа: его размерность ( $n_j$ ) и кратность вхождения ( $m_j$ ) в механическое представление  $\Gamma$  группы симметрии исследуемого буша.

Будем записывать схемы расщепления в виде

$$N_1(M_1) \oplus N_2(M_2) \oplus N_3(M_3) \oplus \dots, \quad (17)$$

где  $N_i$  определяет число независимых подсистем размерности  $M_i$ . Знание схемы расщепления позволяет получить некоторое представление о целесообразности используемой в дальнейшем (обычно достаточно громоздкой) процедуры *явного разбиения* линеаризованной системы  $\ddot{\delta} = J(t) \cdot \delta$  на независимые подсистемы для анализа устойчивости исследуемого буша мод.

#### 4. Устойчивость бушей мод для октаэдрической молекулы

Рассмотрим далее устойчивость нескольких колебательных режимов (бушей мод) в октаэдрической молекуле, изображенной на рис. 3. В состоянии равновесия она представляет собой правильный октаэдр с ребром  $a_0$ , в вершинах которого находятся одинаковые атомы, и характеризуется точечной группой симметрии  $O_h$ . Начало координат выбрано в центре октаэдра. Четыре атома (с номерами 2, 3, 4, 5) лежат в плоскости  $XY$  и образуют квадрат, а два других атома (с номерами 1 и 6) расположены на оси  $Z$ .

Все типы колебательных бушей мод для такой молекулы были рассмотрены в работе [13], и, как уже неоднократно отмечалось, они определяются исходя только из симметричных соображений. С другой стороны, свойства их устойчивости уже существенным образом зависят от сил взаимодействия между атомами рассматриваемой динамической системы. Будем считать, что эти силы определяются некоторым парным сферически-симметричным потенциалом  $u(r)$ , где  $r$  – расстояние между двумя взаимодействующими атомами.

Ниже обсуждается устойчивость трех из возможных бушей мод  $V[O_h]$ ,  $V[D_{4h}]$ ,  $V[C_{4v}]$ , которым отвечают точечные группы симметрии  $O_h$ ,  $D_{4h}$  и  $C_{4v}$ , соответственно.

В связи с ограниченным объемом статьи приводим далее лишь некоторые результаты исследования устойчивости этих динамических режимов, для того что-

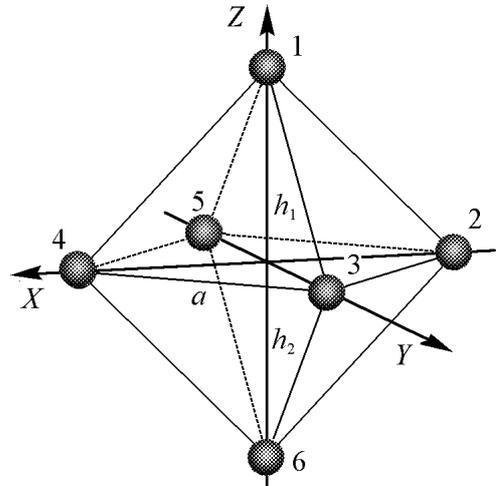


Рис. 3. Октаэдрическая структура с группой симметрии  $O_h$

бы продемонстрировать эффективность развиваемого теоретико-группового аппарата упрощения линеаризованной системы  $\ddot{\delta} = J(t) \cdot \delta$  (детали этого анализа и дальнейшие примеры будут рассмотрены в отдельной публикации).

Начнем со схем расщепления (17) линеаризованной системы (9) для трех указанных выше бушей

$$V[O_h] : 15(1), \quad (18a)$$

$$V[D_{4h}] : 5(1) \oplus 5(2), \quad (18б)$$

$$V[C_{4v}] : 2(1) \oplus 1(2) \oplus 1(3) \oplus 2(4). \quad (18в)$$

(Уравнения, соответствующие поступательному движению молекулы как целого, из рассмотрения исключены.)

В режиме, соответствующем первому бушу  $V[O_h]$ , мгновенная атомная конфигурация является правильным октаэдром, ребро которого  $a = a(t)$  эволюционирует во времени. Это колебательное состояние представляет собой «дыхательную» нелинейную нормальную моду (октаэдр то увеличивается, то уменьшается в размерах относительно своего равновесного состояния с ребром  $a_0$ ), уравнение движения которой имеет вид [13]

$$\ddot{a} = -4u'(a) - \sqrt{2}u'(\sqrt{2}a), \quad (19)$$

где  $u'(r)$  есть производная от потенциала взаимодействия  $u(r)$ .

В соответствии со схемой (18а), линеаризованная система  $\ddot{\delta} = J(t) \cdot \delta$  для буша  $V[O_h]$  расщепляется на 15 независимых уравнений. Все эти уравнения имеют вид

$$\ddot{\delta}_j = \left\{ \left[ \alpha_j \phi(a) + \beta_j \phi(\sqrt{2}a) \right] a^2 + \gamma_j \psi(a) + \lambda_j \psi(\sqrt{2}a) \right\} \delta_j, \quad (20)$$

где функции  $\phi(r)$  и  $\psi(r)$  определены выражениями  $\phi(r) = u''(r)/r^2 - u'(r)/r^3$ ,  $\psi(r) = u'(r)/r$ ,  $a = a(t)$  есть решение уравнения (19), а коэффициенты  $\alpha_j$ ,  $\beta_j$ ,  $\gamma_j$  и  $\lambda_j$ , зависящие от входящих в механическое представление неприводимых представлений группы  $O_h$ , приведены в таблице.

Таблица

Значения коэффициентов  $\alpha_j$ ,  $\beta_j$ ,  $\gamma_j$ ,  $\lambda_j$ ,  $b$ ,  $q$  и границы устойчивости  $\mu_{\min}$  для разных НП группы  $O_h$

НП	$n_j$	$\alpha_j$	$\beta_j$	$\gamma_j$	$\lambda_j$	$b$	$q$	$\mu_{\min}$
$\Gamma_1 = A_1$	1	-4	-4	-4	-2	4	21.700 $\mu_0$	
$\Gamma_5 = E$	2	-1	-4	-4	-2	0.906	4.498 $\mu_0$	0.0206
$\Gamma_7 = F_2$	3	-2	0	-4	-2	2.063	10.435 $\mu_0$	0.126
$\Gamma_8 = F_2'$	3	-1	0	-6	0	1.005	4.135 $\mu_0$	0.00119
$\Gamma_9 = F_1'$	3	0	0	-4	-2	0	-1.033 $\mu_0$	0.879
$\Gamma_{10} = F_1$	3	-3	0	-6	0	3.068	15.604 $\mu_0$	0.219

В первом столбце этой таблицы даны обозначения неприводимых представлений группы  $O_h$ , использованные в работе [13], и соответствующие им обозначения из книги [16] (все указанные НП входят в механическое представление один раз, то есть  $m_j = 1$ ,  $j = 1, 5, 7, 8, 9, 10$ ). Во втором столбце приведены размерности ( $n_j$ )

этих НП, а в последующих четырех столбцах – входящие в уравнения (20) коэффициенты.

Последующий анализ устойчивости зависит от явного вида потенциала  $u(r)$ , в силу чего будем далее полагать, что межатомное взаимодействие в рассматриваемой молекуле описывается потенциалом Леннарда–Джонса

$$u(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}. \quad (21)$$

Более того, не ограничивая общности рассмотрения, будем считать, что  $A = B = 1$  (выполнение этого условия достигается с помощью соответствующей замены переменных в динамических уравнениях системы [13]).

Уравнения (20) с учетом того, что входящий в них параметр  $a = a(t)$  определяется уравнением движения (19) исследуемого буша, являются достаточно сложными. Однако эти уравнения можно существенным образом упростить, принимая во внимание, что граница устойчивости буша  $V[O_h]$ , которая была найдена в работе [13] с помощью прямого численного моделирования (то есть без использования обсуждаемого нами сейчас метода расщепления линеаризованной системы), оказалась весьма малой величиной. Именно, минимальное значение  $\mu_{\min}$  амплитуды колебательной моды  $\mu(t) = \sqrt{3}[a(t) - a_0]$ , при которой уже наступает потеря ее устойчивости, удовлетворяет соотношению  $\mu_{\min} \sim 0.001$ .

Здесь уместно сделать следующее существенное замечание. Известные нам октаэдрические молекулярные структуры, в отличие от той, которая изображена на рис. 3, являются *центрированными*: они имеют еще один атом в центре октаэдра, отличный от атомов в его вершинах. Наличие такого дополнительного атома может существенным образом расширить область устойчивости рассматриваемого буша  $V[O_h]$ . Например, если взаимодействие центрального атома с периферийными атомами описывается также потенциалом Леннарда–Джонса (21), но с параметрами  $A = 1$ ,  $B = 5.5$ , минимальная амплитуда  $A_m$ , при которой происходит потеря устойчивости, составляет, согласно [13], величину порядка единицы (то есть область устойчивости увеличивается на три порядка по сравнению со случаем рассматриваемой нами сейчас нецентрированной октаэдрической структуры).

Воспользовавшись тем, что в нашем случае  $\mu_{\min} \sim 0.001$ , можно разложить коэффициенты уравнений (19) и (20) в степенные ряды по малой величине  $\mu(t) = \sqrt{3}(a(t) - a_0)$ . В результате этой процедуры уравнения движения буша (19) и уравнения (20) линеаризованной системы (после ее расщепления) принимают вид

$$\ddot{\mu} = -4\mu + 21.70\mu^2 - 66.03\mu^3 + \dots, \quad (22)$$

$$\ddot{\delta}_j + (a_j + b_j\mu + c_j\mu^2 + d_j\mu^3 + \dots)\delta = 0, \quad j = 1, \dots, 15, \quad (23)$$

где  $a_j, b_j, c_j, d_j$  суть некоторые постоянные коэффициенты<sup>5</sup>. Здесь через  $\mu = \mu(t)$  обозначена «активная» мода, определяющая наш одномерный буш  $V[O_h]$ , а через  $\delta_j(t)$  ( $j = 1, \dots, 15$ ) – «спящие» моды, то есть те, которые были равны нулю до потери бушем своей устойчивости. Заметим, что одна из этих мод, а именно,  $\delta_1(t)$ ,

<sup>5</sup>При переходе от уравнений (19), (20) к уравнениям (22), (23) был изменен масштаб временной переменной таким образом, чтобы частота колебаний рассматриваемого буша в гармоническом приближении была равна 2.

соответствующая НП  $\Gamma_1$ , дает возмущение «вдоль» активной моды  $\mu(t)$  (то есть просто увеличивает или уменьшает на бесконечно малую величину ее амплитуду) и не имеет, таким образом, отношения к исследованию устойчивости рассматриваемого буша.

В силу условия  $|\mu(t)| \ll 1$  в уравнениях (22), (23) можно ограничиться лишь линейными по  $\mu(t)$  членами. Тогда уравнение для буша (22) превращается в уравнение гармонического осциллятора, с общим решением  $\mu(t) = \mu_0 \cos(\omega t + \phi_0)$  ( $\omega = 2$ )<sup>6</sup>. Подстановка этого решения в уравнения (23) превращает каждое из них в уравнение Матье, которое в стандартной своей форме [17] может быть записано в виде

$$\ddot{z} + [b - 2q \cos(2t)]z = 0. \quad (24)$$

Таким образом, все индивидуальные уравнения (20), на которые расщепляется линеаризованная система, могут быть приближенно сведены к уравнению Матье (24), но с различными<sup>7</sup> коэффициентами  $b$  и  $q$ . Значения этих коэффициентов мы приводим в седьмом и восьмом столбцах таблицы.

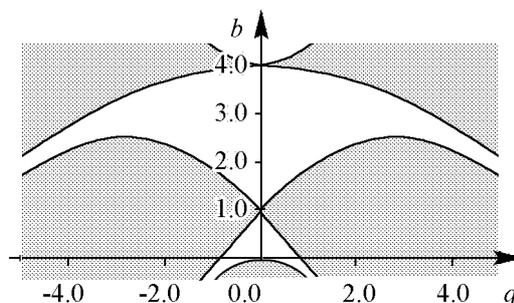


Рис. 4. Диаграмма областей устойчивого и неустойчивого движения для уравнения Матье (24)

Воспользуемся теперь хорошо известной диаграммой устойчивости уравнения Матье (24) в плоскости двух его параметров ( $b, q$ ), которая изображена на рис. 4. Если параметры  $b$  и  $q$  таковы, что попадают в одну из заштрихованных зон (зон неустойчивого движения), нулевое решение уравнения (24) теряет свою устойчивость, и происходит быстрое нарастание модуля переменной  $z(t) \equiv \delta_j(t)$  во времени. В свою очередь, это будет означать, что в рассматриваемой механической системе происходит спонтанное возбуждение некоторой ранее «спящей» (нулевой) моды. Значение параметра  $b$  для всех НП, приведенных в таблице, является фиксированным, а величина  $q$  линейным образом зависит от амплитуды  $\mu_0$  рассматриваемого буша  $V[O_h]$ . Поэтому для каждого из этих НП можно определить минимальную величину  $\mu_{\min}$  амплитуды  $\mu_0$ , при которой параметры  $b$  и  $q$  оказываются в зоне неустойчивого движения<sup>8</sup>. Значения  $\mu_{\min}$  приведены в последнем столбце таблицы.

Таким образом, дальнейший анализ устойчивости одномерного буша  $V[O_h]$  сводится к установлению того минимального значения  $\mu_{\min}$  его амплитуды  $\mu_0$ , при котором начинается возбуждение *хотя бы одной* из спящих мод  $\delta_j(t)$  ( $j = 2, \dots, 15$ ). Такой анализ позволяет выделить именно ту из ранее спящих мод, которая возбуждается первой, приводя тем самым к потере устойчивости буша. Как уже говорилось, при этом происходит переход рассматриваемого одномерного буша в некото-

<sup>6</sup>Начальная фаза  $\phi_0$  не влияет на проводимый ниже анализ устойчивости, в силу чего далее полагаем  $\phi_0 = 0$ .

<sup>7</sup>Значения  $b$  и  $q$  для мод, отвечающих одному и тому же НП группы симметрии  $G = O_h$  рассматриваемого буша, одинаковы.

<sup>8</sup>Границы изображенных на рис. 4 областей устойчивого и неустойчивого движения могут быть заданы соответствующими степенными рядами (см., например, [17]), которые и были нами использованы для нахождения значений  $\mu_{\min}$ .

рый другой буш большей размерности и более низкой (по сравнению с  $O_h$ ) группой симметрии.

Каждому из неприводимых представлений, приведенных в таблице, отвечает некоторое инвариантное относительно группы  $O_h$  подпространство полного 18-мерного пространства атомных смещений

$$\Gamma_1 : a\phi_1^{(1)} = \{0, 0, a \mid -a, 0, 0 \mid 0, a, 0 \mid a, 0, 0 \mid 0, -a, 0 \mid 0, 0, -a\}, \quad (25a)$$

$$\Gamma_5 : a\phi_1^{(5)} + b\phi_2^{(5)} = \{0, 0, -2a \mid b - a, 0, 0 \mid 0, a + b, 0 \mid a - b, 0, 0 \mid 0, -a - b, 0 \mid 0, 0, 2a\}, \quad (25б)$$

$$\Gamma_7 : a\phi_1^{(7)} + b\phi_2^{(7)} + c\phi_3^{(7)} = \{b, a, 0 \mid 0, -c, -b \mid c, 0, a \mid 0, c, b \mid -c, 0, -a \mid -b, -a, 0\}, \quad (25в)$$

$$\Gamma_8 : a\phi_1^{(8)} + b\phi_2^{(8)} + c\phi_3^{(8)} = \{a, -b, 0 \mid 0, b, -c \mid -a, 0, c \mid 0, b, -c \mid -a, 0, c \mid a, -b, 0\}, \quad (25г)$$

$$\Gamma_9 : a\phi_1^{(9)} + b\phi_2^{(9)} + c\phi_3^{(9)} = \{-b, a, 0 \mid 0, c, -b \mid c, 0, -a \mid 0, -c, b \mid -c, 0, a \mid b, -a, 0\}, \quad (25д)$$

$$\Gamma_{10} : a\phi_1^{(10)} + b\phi_2^{(10)} + c\phi_3^{(10)} = \{a, b, -2c \mid -2a, b, c \mid a, -2b, c \mid -2a, b, c \mid a, -2b, c \mid a, b, -2c\}, \quad (25е)$$

где  $a$ ,  $b$  и  $c$  – произвольные постоянные,  $\phi_i^{(j)}$  ( $i = 1, \dots, n_j$ ) – базисные векторы (см. [13]) неприводимого представления  $\Gamma_j$  размерности  $n_j$  ( $j = 1, 5, 7, 8, 9, 10$ ), компоненты которых суть смещения атомов рассматриваемой молекулы из своих положений равновесия вдоль координатных осей  $X$ ,  $Y$  и  $Z$ . Каждое из этих подпространств определяет особый тип деформаций октаэдра, изображенного на рис. 3. Например, неприводимому представлению  $\Gamma_1$  отвечает «дыхательная» мода: атомы в процессе колебаний в каждый момент времени по-прежнему образуют октаэдр, но с ребром, отличным от  $a_0$ . Возмущения, принадлежащие подпространству (25а), являются возмущениями «вдоль» рассматриваемого буша и, как уже говорилось, не имеют отношения к потере его устойчивости. Деформация октаэдра (25б), соответствующая НП  $\Gamma_5$ , происходит за счет смещения всех пар атомов, лежащих на координатных осях, вдоль этих осей навстречу друг другу (причем, лежащие на данной оси атомы имеют одинаковые по величине, но противоположно направленные смещения). Аналогичным образом можно представить себе характер деформаций октаэдра, соответствующих каждому из других подпространств (25).

При потере устойчивости буша  $V[O_h]$  должно происходить возбуждение колебаний в одном или нескольких из вышеописанных инвариантных подпространств (25б)–(25е). Возбуждение колебаний, принадлежащих тому или другому подпространству, происходит при амплитуде  $\mu_0$  рассматриваемого буша, превышающей значение  $\mu_{\min}$ , которое *существенно различно* для разных НП его группы симметрии. Очевидно, *порог* потери устойчивости буша  $V[O_h]$  определяется тем из подпространств (25б)–(25е), которому отвечает наименьшее значение амплитуды  $\mu_{\min}$ , при котором происходит возбуждение колебаний внутри данного подпространства. Из последнего столбца таблицы находим, что таким «критическим» для потери устойчивости буша  $V[O_h]$ , по мере увеличения от нуля его амплитуды, является трехмерное подпространство (25г), отвечающее неприводимому представлению  $\Gamma_8$ .

Подчеркнем еще раз, что обсуждаемый в настоящей работе теоретико-групповой аппарат позволяет (по крайней мере, в случае буша  $V[O_h]$ ) не только найти границу устойчивости, но и обнаружить «основного виновника» потери устойчивости (в рассматриваемом случае это – взаимодействие буша  $V[O_h]$  с модами, преобразующимися по неприводимому представлению  $\Gamma_8$ ), что важно для выяснения физической природы этого явления. Как уже отмечалось в работе [13] маленькая величина порога устойчивости буша  $V[O_h]$  ( $\mu_{\min} \sim 0.001$ ) связана с близостью механической системы к *внутреннему резонансу*  $\omega_1 = 2\omega_8$ , где  $\omega_1$  и  $\omega_8$  суть частоты линейных нормальных мод, отвечающих неприводимым представлениям  $\Gamma_1$  (это НП описывает дыхательную моду) и  $\Gamma_8$ , соответственно.

Перейдем к исследованию устойчивости двумерного буша  $V[D_{4h}]$ . Из схемы расщепления (18б) ясно, что исследование устойчивости теперь оказывается не столь простым, как в случае буша  $V[O_h]$ , поскольку кроме индивидуальных уравнений обсуждаемого выше типа (см. формулу (20)) появляются *двумерные* системы уравнений. С помощью разложения по малым амплитудам входящих в буш мод<sup>9</sup>, все эти системы могут быть сведены к единому виду

$$\begin{aligned} \ddot{y} + f_{11}y + f_{12}z &= 0, \\ \ddot{z} + f_{12}y + f_{22}z &= 0, \end{aligned} \tag{26}$$

где  $f_{ij} = a_{ij} + b_{ij} \cos(t) + c_{ij} \cos(\omega t + \phi_0)$ , а  $a_{ij}$ ,  $b_{ij}$ ,  $c_{ij}$ ,  $\omega$  и  $\phi_0$  – некоторые постоянные величины.

Для систем (26) нам неизвестны готовые диаграммы устойчивости типа той, которую мы имеем для уравнения Матье. Тем не менее устойчивость нулевого решения систем (26) может быть исследована численными методами. Заметим, что уравнения (26) не подпадают под стандартное исследование устойчивости с помощью метода Флоке, поскольку бушу  $V[D_{4h}]$  отвечает не периодическое, а *квазипериодическое* движение.

<sup>9</sup>Согласно [13] граница устойчивости этого буша также достаточно мала ( $\mu_{\min} \sim 0.01$ ), в силу чего такое разложение оправдано.

В случае буша  $B[D_{4h}]$  также можно выделить то НП, по отношению к модам которого теряется его устойчивость в первую очередь по мере увеличения амплитуд колебаний. Разумеется такой анализ более прост и информативен, по сравнению с исследованием устойчивости исходной линеаризованной системы (9), состоящей из 15 связанных друг с другом уравнений.

### Заключение

Разработан теоретико-групповой метод, который позволяет в ряде случаев существенным образом упростить исследование устойчивости динамических режимов в системах с дискретной симметрией за счет расщепления линеаризованной (в окрестности рассматриваемого режима) системы нелинейных дифференциальных уравнений на некоторое число независимых подсистем малой размерности. При изложении метода предполагается, что исходная физическая система описывается автономными дифференциальными уравнениями второго порядка (5). Поскольку были использованы лишь теоретико-групповые соображения, основанные на том, что любой динамический режим характеризуется некоторой подгруппой группы симметрии уравнений движения, описывающих исследуемую физическую систему, достаточно ясно, что предлагаемый метод можно обобщить на гораздо более широкий класс динамических систем, в частности, диссипативных. Такое обобщение, однако, выходит за рамки настоящей работы.

Авторы выражают свою благодарность В.П. Сахненко за многогранную помощь и плодотворные «нелинейные» дискуссии.

*Настоящая работа выполнена в рамках гранта Южного Федерального Университета (2008 г.).*

### Библиографический список

1. *Chechin G. M., Zhukov K. G.* Stability analysis of dynamical regimes in nonlinear systems with discrete symmetries // *Phys. Rev. E.* 2006. Vol. 73. P. 36216.
2. *Сахненко В. П., Чечин Г. М.* Симметричные правила отбора в нелинейной динамике атомных систем // *ДАН.* 1993. Т. 330. С. 308.
3. *Сахненко В. П., Чечин Г. М.* Кусты мод и нормальные колебания для нелинейных динамических систем с дискретной симметрией // *ДАН.* 1994. Т. 338. С. 42.
4. *Chechin G. M., Sakhnenko V. P.* Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results // *Physica D.* 1998. Vol. 117. P. 43.
5. *Chechin G. M., Ryabov D. S., Sakhnenko V. P.* Bushes of normal modes as exact excitations in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. In: «Nonlinear Phenomena Research Perspectives», p. 225, ed. C.W. Wang, Nova Science Publishers, NY, 2007.

6. *Сиротин Ю. И., Шаскольская М. П.* Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1975.
7. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. Т. I. Механика. М.: Наука, 1988.
8. *Rosenberg R. M.* The normal modes of nonlinear  $n$ -degree-of-freedom systems // J. Appl. Mech. 1962. Vol. 29. P. 7.
9. *Rosenberg R. M.* On nonlinear vibrations of systems with many degrees of freedom // Adv. Appl. Mech. 1966. Vol. 9. P. 155.
10. *Chechin G. M., Novikova N. V., Abramenko A. A.* Bushes of vibrational modes for Fermi–Pasta–Ulam chains // Physica D. 2002. Vol. 166. P. 208.
11. *Chechin G. M., Ryabov D. S., Zhukov K. G.* Stability of low dimensional bushes of vibrational modes in the Fermi–Pasta–Ulam chains // Physica D. 2005. Vol. 203. P. 121.
12. *Chechin G. M., Sakhnenko V. P., Stokes H. T., Smith A. D., Hatch D. M.* Non-linear normal modes for systems with discrete symmetry // Int. J. Non-Linear Mech. 2000. Vol. 35. P. 497.
13. *Chechin G. M., Gnezdilov A. V., Zekhtser M. Yu.* Existence and stability of bushes of vibrational modes for octahedral mechanical systems with Lennard–Jones potential // Int. J. Non-Linear Mech. 2003. Vol. 38. P. 1451.
14. *Эллиот Дж., Добер П.* Симметрия в физике. М.: Мир, 1983.
15. *Петрашень М. И., Трифонов Е. Д.* Применение теории групп в квантовой механике. М.: Наука, 1967.
16. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974.
17. *Справочник по специальным функциям / Под ред. Абрамовица М. и Стиган И.* М.: Наука, 1979.

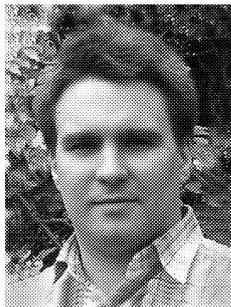
*Южный Федеральный Университет  
НИИ физики, Ростов-на-Дону*

*Поступила в редакцию 19.03.2008  
После доработки 18.04.2008*

**GROUP-THEORETICAL METHODS FOR SIMPLIFICATION  
OF STABILITY ANALYSIS OF DYNAMICAL REGIMES  
IN NONLINEAR SYSTEMS WITH DISCRETE SYMMETRY**

*K.G. Zhukov, G.M. Chechin*

We present a detailed description of the group-theoretical method which has been published in 2006 by the authors. This method can frequently simplify the study of the stability of different dynamical regimes in nonlinear physical systems with discrete symmetry since it allows one to split the set of the linearized (near a considered regime) nonlinear differential equations into a number of independent subsets of small dimensions. The above method is illustrated with the case of stability analysis of some dynamical regimes in the simple octahedral structure.



*Жуков Константин Геннадьевич* – родился в Ростове-на-Дону (1982), окончил магистратуру физического факультета РГУ (2005). Аспирант НИИ физики Южного федерального университета. Область научных интересов – нелинейная динамика, теоретико-групповые методы в физике, вычислительная физика. Автор 5 научных публикаций.  
E-mail: kgz@inbox.ru



*Чечин Георгий Михайлович* – родился в Новочеркасске (1937), окончил РГУ (1960), кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической и вычислительной физики Южного федерального университета. Научный руководитель студенческой «Лаборатории нелинейной кристаллофизики» при НИИ физики ЮФУ, Соросовский доцент. Читает лекции по теории групп, численным методам, вычислительной и нелинейной физике. Область научных интересов – теоретико-групповые методы в физике, теория фазовых переходов, нелинейная динамика и вычислительная физика. Автор более 100 научных публикаций.  
E-mail: chechin@aaanet.ru