1989 ЖУРНАЛ ТЕХНИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ Том 59, в. 5
1989 JOURNAL OF TECHNICAL PHYSICS Vol. 59, N 5

01

ДВИЖЕНИЕ ДАВЫДОВСКОГО СОЛИТОНА В ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

А. А. Вахненко, А. А. Еремко

Исследовано движение давыдовского солитона во внешнем периодическом потенциале искажений цепочки. В статическом потенциале из-за неравномерности движения солитон генерирует звуковые волны и тормозится. Взаимодействие солитона с бегущей звуковой волной приводит к увлечению солитона за счет передачи ему части энергии волны. Для электросолитонов такое увлечение может быть зарегистрировано по характерной зависимости возникающего в образце тока от длины звуковой волны.

Введение

Изучение свойств солитонов в молекулярных и других квазиодномерных структурах приобретает в последнее время все более широкий размах [1, 2]. Солитонные концепции привлекаются для решения целого ряда проблем — от устранения кризиса в биоэнергетике [3] до объяснения высокотемпературной сверхпроводимости [4]. Тем не менее вопросы надежной идентификации солитонов со стороны экспериментаторов еще не находят достаточного внимания.

Одним из экспериментов по обнаружению солитонов (точнее электросолитонов), по нашему мнению, мог бы оказаться эксперимент, регистрирующий возникновение электрического тока в образце, помещенном в поле бегущей звуковой волны. Такого рода эффект возможен за счет увлечения солитонов бегущей звуковой волной. Вопрос о том, как возникает такое увлечение, и составляет основной предмет настоящего исследования.

1. Уравнение движения центра тяжести солитона

Для описания самосогласованных комбинаций внутримолекулярных возбуждений со смещениями молекул в целом ряде квазиодномерных структур часто применяют модель давыдовских солитонов [1, 2, 3, 5]. В зависимости от природы квазиодномерной цепочки под внутримолекулярным возбуждением (далее для краткости возбуждением) понимают избыточный электрон, бестоковое электронное возбуждение либо внутримолекулярное колебание.

Изучим влияние пространственных неоднородностей, присущих цепочке как таковой или вызванных внешними (например, звуковыми) полями, на движение давыдовского солитона. Для этого воспользуемся следующей системой уравнений:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+2a\chi\rho\right)\Psi=\varepsilon U\Psi, \tag{1а}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}-v_a^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\rho+2v_a^2\frac{\chi}{w}\frac{\partial^2}{\partial x^2}|\Psi|^2=0, \tag{1б}$$

$$\rho\equiv-\frac{\partial}{\partial x}\beta. \tag{1в}$$

Здесь m — эффективная масса свободного возбуждения (экситона), χ — константа взаимодействия экситонной и упругой подсистем, w — коэффициент упругости цепочки, v_a — скорость звука, a — постоянная решетки, x — координата, t — время. Величина Ψ имеет смысл амплитуды вероятности распределения возбуждения по цепочке, а β — поля смещений молекул из равновесных положений, вызванных присутствием возбуждения в цепочке. Член $\varepsilon U \Psi$ учитывает пространственную неоднородность цепочки и считается малым.

Следуя работам [6, 7], решение системы уравнений (1а), (1б) в первом порядке по параметру ε ищем в виде

$$\rho = \frac{2\chi}{w(1-\dot{\zeta}^2/v_a^2)} |\Psi|^2 + \varepsilon r, \tag{2а}$$

$$\Psi = \Psi_s + \varepsilon \varphi. \tag{2б}$$

Здесь

$$\Psi_s(x, t) = \sqrt{\frac{q}{2}} \operatorname{sech}[q(x-\zeta)] \exp[ik(x-\zeta) + i\theta] \tag{3}$$

— функция односолитонного адиабатического приближения, параметры q, ζ, k и θ которой предполагаются зависящими от времени. Уравнения для этих параметров следуют из условий отсутствия в поправке $\varepsilon\varphi$ секулярных членов. Так, в нерелятивистском пределе $\dot{\zeta}^2 \ll v_a^2$, рассмотрением которого далее и ограничимся, для координаты центра тяжести солитона ζ будем иметь

$$[m + M(0)]\ddot{\zeta}(t) - \int_0^\infty d\tau M(\tau) \ddot{\zeta}(t-\tau) = F(t), \tag{4}$$

где

$$M(t) = \frac{4aq\chi^2}{wv_a^2} [qv_a t \operatorname{ch}(qv_a t) - \operatorname{sh}(qv_a t)] \operatorname{cosech}(qv_a t), \tag{5}$$

$$F(t) = -\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi_s(x, t)|^2 \frac{\partial}{\partial x} U(x, t). \tag{6}$$

При этом q от времени не зависит

$$q = \frac{2ma\chi^2}{\hbar^2 w}, \tag{7}$$

а поправка εr, как можно показать, определяется выражением

$$\varepsilon r(x, t) = \frac{q\chi}{2wv_a} \int_0^\infty d\tau \ddot{\zeta}(t-\tau) \{\operatorname{sech}^2[q(x + v_a\tau - \zeta(t-\tau))] - \operatorname{sech}^2[q(x - v_a\tau - \zeta(t-\tau))]\}, \tag{8}$$

т. е. описывает реакцию упругой подсистемы на неравномерность движения солитона. Вдали от солитона эту поправку следует трактовать как поле излученных им звуковых волн.

Из (4) и (6) видно, что специфика пространственных неоднородностей, моделируемых потенциалом εU, проявляется в характере действующей на солитон внешней силы F.

Во многих физически интересных случаях характерное время изменения координаты центра тяжести солитона велико по сравнению со временем прохождения звуком расстояния, равного размеру солитона. Тогда уравнение движения солитона (4) приводится к виду

$$m_s\ddot{\zeta} - \frac{2a\chi^2}{wv_a^3} \dddot{\zeta} = F, \tag{9}$$

так как эффекты запаздывания оказываются несущественными. Здесь

$$m_s = \left(1 + \frac{8a^2\chi^4}{3\hbar^2 w^2 v_a^2}\right) m \tag{10}$$

— масса солитона. При этом непротиворечивость полученного уравнения (9) (т. е. малость силы торможения излучением по сравнению с внешней силой [8]) обеспечивается автоматически.

Конкретизация вида внешней силы в уравнении (9) позволяет рассмотреть ряд интересных моделей. Остановимся на некоторых из них.

2. Движение солитона в статическом периодическом потенциале

Будем моделировать статические пространственные неоднородности цепочки периодическим потенциалом, причем для простоты ограничимся лишь одной его гармоникой. Тогда в соответствии с (6) действующая на солитон внешняя сила запишется так:

$$F = -F_0 \sin\left(2\pi \frac{\zeta}{L}\right), \tag{11}$$

где L — характерный масштаб пространственных неоднородностей.

Такая модель, по-видимому, применима для выяснения основных закономерностей движения солитонов (электросолитонов в монокристаллах полидиацетилена [5], например) в поле стоячей звуковой волны. Ее можно отнести также и к солитонам в α-спиральных белках с достаточно регулярным чередованием различных пептидных групп.

В зависимости от соотношения между начальной энергией солитона E_0 и глубиной эффективного потенциального рельефа F_0L/π рассматриваемая модель (9), (11) описывает два существенно разных режима движения.

Так, солитон с малой энергией $E_0 < F_0L/\pi$ захватывается ближайшей потенциальной ямой и совершает в ней затухающие колебания. При $E_0 \ll F_0L/\pi$ амплитуда таких колебаний мала и вид решения легко выписать явно. Например, для начальных условий $\dot\zeta(0)=v_0$, $\zeta(0)=0$ получим

$$\zeta = \frac{v_0}{\Omega} \exp(-\Gamma t) \sin(\Omega t), \quad (\Gamma \ll \Omega,\ m_s v_0^2/2 \ll F_0 L/\pi), \tag{12}$$

где

$$\Gamma = \frac{2\pi a \chi^2 F_0}{w m_s^2 v_a^3 L}, \quad \Omega = \sqrt{\frac{2\pi F_0}{m_s L}}. \tag{13}$$

Захват же солитона с большой начальной энергией $E_0 > F_0L/\pi$ невозможен до тех пор, пока он не потеряет часть своей энергии на излучение звука. Потери энергии на излучение приводят к торможению солитона. Факт такого торможения легко усмотреть из характера функциональной зависимости

$$\dot\zeta = v(\zeta). \tag{14}$$

Наиболее просто такую зависимость удается получить для случая $E_0 \gg F_0L/\pi$. В самом деле, используя малость параметра Γ/Ω, из уравнения

$$m_s v \frac{d}{d\zeta} v - \frac{2a\chi^2}{w v_a^3}\left[v\left(\frac{d}{d\zeta}v\right)^2 + v^2 \frac{d^2}{d\zeta^2} v\right] + F_0 \sin\left(2\pi \frac{\zeta}{L}\right) = 0 \tag{15}$$

по методу многих масштабов [9] для начальных условий $\dot\zeta(0)=v_0$, $\zeta(0)=0$ находим

$$v = \sqrt{2\left(\frac{L\Omega}{2\pi}\right)^2 \cos\left(2\pi\frac{\zeta}{L}\right) + \left\{\left[v_0^2 - 2\left(\frac{L\Omega}{2\pi}\right)^2\right]^{3/2} - 3\Gamma\zeta\left(\frac{L\Omega}{2\pi}\right)^2\right\}^{2/3}}. \tag{16}$$

Это выражение позволяет качественно верно описать ход зависимости $\dot\zeta = v(\zeta)$ вплоть до ζ порядка

$$\zeta_0 = \frac{\Omega}{\Gamma}\left(\frac{v_0}{L\Omega}\right)^3 L. \tag{17}$$

Примечательно, что в силу принятых неравенств ($\Omega \gg \Gamma$ и $m_s v_0^2/2 \gg F_0L/\pi$) параметр ζ_0 значительно превышает характерный размер пространственных неоднородностей L. Из (14) и (16) видно, что с увеличением пройденного пути ζ скорость солитона $\dot{\zeta}$ в среднем убывает, т. е. солитон действительно тормозится.

3. Увлечение солитона бегущей волной

Выясним теперь характер движения солитона в поле бегущей волны, считая солитон первоначально покоящимся $\dot{\zeta}(0)=0$, $\zeta(0)=0$. Для определенности будем интересоваться бегущей звуковой волной синусоидального профиля. Действующая на солитон внешняя сила при этом запишется так:

$$F = -Q_0 \sin\left(2\pi \frac{\zeta - v_a t}{\lambda}\right), \tag{18}$$

где амплитуда силы Q_0 связана с амплитудой смещений молекул в волне A и длиной волны λ соотношением

$$Q_0 = aA\chi\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \frac{\pi^2/q\lambda}{\operatorname{sh}(\pi^2/q\lambda)}. \tag{19}$$

Введем вспомогательную координату

$$\xi = v_a t - \zeta. \tag{20}$$

Координата ξ со временем не убывает, так как скорость солитона всегда меньше скорости звука. Поэтому при анализе основных закономерностей движения солитона имеет смысл обратиться к функциональной зависимости

$$\dot{\zeta} = u(\xi). \tag{21}$$

Найдем ее для наиболее реалистичного случая, когда мгновенный захват солитона волной невозможен $Q_0\lambda/\pi \ll m_s v_a^2/2$. Для этого учтем, что функция $u(\xi)$ в силу (9), (18), (20) и (21) удовлетворяет уравнению

$$m_s(u - v_a)\frac{d}{d\xi}u + \frac{2a\chi^2}{wv_a^3}\left[(u - v_a)\left(\frac{d}{d\xi}u\right)^2 + (u - v_a)^2\frac{d^2}{d\xi^2}u\right] + \\ + Q_0 \sin\left(2\pi\frac{\xi}{\lambda}\right) = 0, \tag{22}$$

$$u(\xi = 0) = 0,$$

а также используем малость параметра γ/ω, где

$$\gamma = \frac{2\pi a\chi^2 Q_0}{wm_s^2 v_a^3 \lambda}, \quad \omega = \sqrt{\frac{2\pi Q_0}{m_s\lambda}}. \tag{23}$$

По методу многих масштабов [9] получим

$$u = v_a - \sqrt{2\left(\frac{\lambda\omega}{2\pi}\right)^2 \cos\left(2\pi\frac{\xi}{\lambda}\right) + \left\{\left[v_a^2 - 2\left(\frac{\lambda\omega}{2\pi}\right)^2\right]^{3/2} - 3\gamma\xi\left(\frac{\lambda\omega}{2\pi}\right)^2\right\}^{2/3}}. \tag{24}$$

Функция $u(\xi)$ с ростом ξ в среднем возрастает, поэтому скорость солитона $\dot{\zeta}$ со временем увеличивается. Бегущая волна увлекает солитон за счет передачи ему части своей энергии. Из-за ограничения $\dot{\zeta}^2 \ll v_a^2$ развитый подход не позволяет количественно описать этот эффект при больших скоростях.

В заключение еще раз отметим, что рассмотренная выше модель могла бы быть проверена в экспериментах по регистрации электрического тока, обусловленного увлечением электросолитонов (например, в полидиацетилене) полем бегущей звуковой волны. При этом можно использовать, например, процедуру компенсации указанного тока внешним электрическим полем. Величина напряженности компенсирующего поля $\mathscr{E}_c$, как следует из (21), (24) и (20), должна подчиняться закономерности

$$\mathscr{E}_c = \frac{a\chi^2 Q_0^2}{ewm_s^2 v_a^4}, \tag{25}$$

где e — заряд электросолитона.

Литература

[1] *Давыдов А. С., Кислуха Н. И.* // ЖЭТФ. 1976. Т. 71. Вып. 9. С. 1090—1098.
[2] *Давыдов А. С.* Солитоны в молекулярных системах. Киев: Наукова думка, 1984. 288 с.
[3] *Davydov A. S.* // Studia Biophys. 1977. Vol. 62. N 1. P. 1—8.
[4] *Давыдов А. С., Брижик Л. С.* // Физика низких температур. 1987. Т. 13. № 11. С. 1222—1225.
[5] *Wilson E. G.* // J. Phys. C. 1983. Vol. 16. N 35. P. 6739—6755.
[6] *Давыдов А. С., Еремко А. А.* // ТМФ. 1980. Т. 43. № 3. С. 367—377.
[7] *Еремко А. А., Сергиенко А. И.* // Современные проблемы физики твердого тела и биофизики. Киев, 1982. С. 49—60.
[8] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория поля. М.: Наука, 1973. 504 с.
[9] *Найфэ А. Х.* Методы возмущений. М.: Мир, 1976.

Институт теоретической физики
АН УССР
Киев

Поступило в Редакцию
29 февраля 1988 г.