

ДИНАМІКА ДАВИДОВСЬКОГО СОЛІТОНА В ОСЦИЛЮЮЧОМУ МАГНІТНОМУ ПОЛІ, СПРЯМОВАНОМУ ВЗДОВЖ МОЛЕКУЛЯРНОГО ЛАНЦЮЖКА

К. В. Темченко^{1, а}, Л. С. Брижик^{2, б}

¹Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»

²Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України

Анотація

В даній роботі досліджується вплив осцилюючого магнітного поля, направленого вздовж молекулярного ланцюжка на динаміку давидовського солітона. Такий солітон утворюється в молекулярному ланцюжку внаслідок врахування електрон-фононої взаємодії та описує автолокалізований стан надлишкового електрона в деформаційному потенціалі. Показано, що в періодичному магнітному полі, поперечному напрямку ланцюжка, динаміка солітона складається з руху електрона вздовж ланцюжка у стані вільного солітона (солітона за відсутності поля) та руху у поперечному до ланцюжка напрямі, що описується функціями гармонійного осцилятора.

Ключові слова: Давидовський солітон, осцилююче магнітне поле, низькорозмірні молекулярні системи

Вступ

Коли йде мова про перенесення збуджень, електронів та протонів в середовищі, необхідно зауважити, що чи не найефективнішими відомими сьогодні носіями такого переміщення є бездисипативні солітони.

Солітон являє собою локалізований хвильовий пакет, проте має виключно нелінійну природу. Відомий ефект розповзання хвильового пакету внаслідок дисперсії середовища компенсується в солітонах нелінійністю (самозжиманням хвиль). В результаті отримується усамітнена хвиля, яка має певну амплітуду і швидкість, не втрачає енергію та розповсюджується як одне ціле. А при взаємодії одного з одним солітони ведуть себе як частинки, зберігаючи свою стабільність, швидкість та форму.

Як не дивно це може здатися, численні теоретичні розрахунки і експериментальні дослідження безумовно продемонстрували існування і широке поширення солітонів в різноманітних фізичних системах (оптичні середовища, плазма, поверхневі хвилі на воді, пружні середовища, атмосфера, низькорозмірні молекулярні системи та ін.) [1, 2, 3]. Фізики все більше і більше приходять до переконання, що солітони можуть грати фундаментальну роль в різних областях фізики, біології та інших галузях науки і техніки.

На динаміку солітонів в молекулярних системах впливають різноманітні зовнішні чинники, в тому ж числі магнітні поля. Перш за все варто відзначити, що магнітне поле Землі всюдишче як геомагнітне та геліомагнітне, так і як поле, утворене зовнішніми чинниками (технічними, індустриальними та побутовими приладами, лініями електропередачі, приладами мобільного зв'язку та ін.). Тому актуальною

є проблема встановлення динамічних властивостей солітонів в зовнішньому магнітному полі, що важливо як для приладів мікроелектроніки [4], так і для встановлення наслідків впливу магнітних полів на біологічні процеси [5]. Так в [6] було досліджено динаміку в постійному магнітному полі, в [7] було досліджено вплив високочастотного і електромагнітного поля. А динаміка солітонів в періодичному магнітному полі досі залишається актуальною і потребує дослідження. Ця проблема і розглядається в даній роботі.

1. Вільний молекулярний солітон

Так як було вперше запропоновано О. С. Давидовим [3], особливу роль в перенесенні енергії та зарядів на макроскопічні відстані (до сотень ангстремів) в біологічних процесах відіграють макромолекули, такі як ДНК та альфа-спіральні білкові молекули, в яких електрон-фононна взаємодія є істотною. Саме завдяки цій взаємодії в таких макромолекулах (а також в інших молекулярних системах, як полідіацетилен та інші полімерні та молекулярні сполуки) має місце автолокалізація квазічастинки (електрон, дірка, протон, молекулярне збудження) у солітонному стані.

Розглянемо молекулярний ланцюжок з надлишковим електроном з урахуванням електрон-фононої взаємодії в ньому. Як було показано в [3, 8] такий ланцюжок описується гамільтоніаном Фр'єліха

$$H = H_e + H_{ph} + H_{el-ph},$$

де H_e – гамільтоніан електрона, H_{ph} – гамільтоніан фононої підсистеми (тобто гамільтоніан ланцюжка, що описується в термінах елементарних збуджень, тобто фононів), H_{el-ph} – гамільтоніан електрон-фононої взаємодії.

^аkatyatemchenko@gmail.com

^бbrizhik@bitp.kiev.ua

Скористаємося континуальним наближенням для опису ланцюжка, тобто перейдемо від дискретних змінних n , що нумерують молекули, до неперервної змінної $x = na$. Тоді гамільтоніан електрона в такому ланцюжку є гамільтоніаном електрона у зумовленому ним потенціалі деформації ланцюжка:

$$H_e = \sum \left[\frac{p^2}{2m_x} - \sigma \rho(x, t) \right].$$

Це приводить до наступних рівнянь руху для електронної та фононної підсистем:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H \psi(\vec{r}, t); \quad (1)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - V_0^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \rho(x, t) + \frac{\sigma a^2}{M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} |\psi(x, t)|^2 = 0.$$

Тут $\psi(x, t)$ – хвильова функція електрона, $\rho(x, t)$ – деформація ланцюжка, σ – стала електрон-фононної взаємодії, a – стала ґратки, M – маса елементарної комірки, V_0 – швидкість звуку в такому ланцюжку.

Розв'язком цієї системи рівнянь і є так званий молекулярний солітон (давидовський солітон). Опишемо його детальніше.

В довгохвильовому наближенні ці рівняння зводяться до нелінійного рівняння Шредінґера:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\sigma \rho(x, t)}{2Jg} \right) \psi(x, t) = 0,$$

де J – стала обмінної взаємодії у ланцюжку, g – безрозмірна стала електрон-фононної взаємодії:

$$g = \frac{\sigma^2}{2Jw(1-s^2)}, \quad w = \frac{MV_0^2}{a^2}, \quad s = |V|/V_0.$$

Тут введено позначення для s – відносної швидкості солітона та для w – сталої пружності ланцюжка, яка і визначає швидкість звуку у ньому.

Це рівняння за умови $s^2 < 1$ має відомий солітонний розв'язок:

$$\psi_s(x, t) = \frac{1}{2} \sqrt{g} \operatorname{sech} [g(x - Vt)/a] \exp [i(k_x x - \omega t)],$$

амплітуда якого вибрана з умови нормування хвильової функції електрона на одиницю.

Повна енергія покою солітона (включаючи енергію деформації ланцюжка) менша за енергію вільного електрона у ланцюжку, яка вибрана за початок відліку енергії, на енергію зв'язування, і має вираз

$$E_s(0) = -\frac{Jg_0^2}{12}, \quad g_0 = \sigma^2/2Jw.$$

Повна енергія солітона, що рухається, у наближенні ефективної маси ($V^2 \ll V_0^2$), задається виразом:

$$E_s(V) = E_s(0) + \frac{1}{2} M_s V^2,$$

$$M_s \approx m_x + \frac{m_x M \sigma^4}{6w^3 \hbar^2}.$$

Величина M_s – ефективна маса солітона, що перевищує масу вільного електрона в зоні провідності ланцюжка, m_x , завдяки зв'язку з зумовленою електроном деформацією ланцюжка (так званий поляронний ефект). У загальному випадку ефективна маса солітона залежить від його швидкості (див.[3]).

2. Рівняння руху солітона в магнітному полі та їх розв'язок

У цьому розділі ми розглянемо вплив осцилюючого магнітного поля на солітон. Перш за все зауважимо, що у цьому випадку необхідно узагальнити розгляд нашої проблеми на тривимірний простір, в якому для визначеності будемо вважати одновимірний ланцюжок направленим по осі x .

Тоді для хвильової функції справедливо:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_s(x, t) \psi_\perp(y, z, t).$$

Гамільтоніан електрона матиме вигляд:

$$H_e = \sum_{\nu=1}^3 \left[\left(p_\nu - \frac{e}{c} A_\nu \right)^2 \frac{1}{2m_\nu} - \sigma \rho(x, t) \right]. \quad (2)$$

У загальному випадку магнітне поле має довільний напрямок. Ми завжди можемо розкласти магнітне поле на поздовжню (вздовж молекулярного ланцюжка) та поперечну компоненти. У відповідності до цього ми і розглянемо два випадки: магнітне поле орієнтоване вздовж молекулярних ланцюжків та впоперек. В даній роботі розглядається перший.

Задамо поздовжнє періодичне магнітне поле:

$$\vec{B}(t) = (B_0 \cos \omega t, 0, 0).$$

Тоді, виходячи з означення векторного потенціалу магнітного поля ($\vec{B} = \operatorname{rot} \vec{A}$), можемо вибрати таку калібровку поля, в якій векторний потенціал має вигляд:

$$\vec{A} = (0, -B_0 z \cos \omega t, 0). \quad (3)$$

Відповідно до квантової механіки [9], при врахуванні магнітного поля у відповідному гамільтоніані необхідно зробити заміну p . Враховуючи те, що $p_\nu = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_\nu}$ та виходячи з (3) отримуємо для (2) :

$$H_s = -\frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \sigma \rho(x, t); \quad (4)$$

$$H_\perp = \frac{1}{2m_x} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{2i\hbar e}{c} B_0 z \cos \omega t \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e^2}{c^2} B_0^2 z^2 \cos^2 \omega t \right) - \frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (5)$$

Тут m_ν – відповідні компоненти тензору мас електрона у зоні провідності кристалу.

За допомогою рівнянь (4) та (5), для хвильової функції солітона (1) маємо:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi_s(x, t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{\partial^2 \psi_s(x, t)}{\partial x^2} + \sigma \rho(x, t) \psi_s(x, t) = 0; \\ i\hbar \frac{\partial \psi_\perp(y, z, t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_y} \frac{\partial^2 \psi_\perp(y, z, t)}{\partial y^2} + \\ + \frac{i\hbar e}{m_y c} B_0 z \cos \omega t \frac{\partial \psi_\perp(y, z, t)}{\partial y} - \\ - \frac{e^2}{2m_y c^2} B_0^2 z^2 \cos^2 \omega t \psi_\perp(y, z, t) + \\ + \frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{\partial^2 \psi_\perp(y, z, t)}{\partial z^2} = 0. \quad (6) \end{aligned}$$

Тут $\psi_s(x, t)$ – хвильова функція вільного солітона.

Розв'язок рівняння (6) шукаємо у вигляді добутку плоскої хвилі у одному напрямку (наприклад, y) та невідомої функції у іншому напрямку, z :

$$\psi_{\perp}(y, z, t) = \frac{1}{\sqrt{l_y}} \varphi(z, t) \exp\left(ik_y y - iE_{\perp} t \frac{1}{\hbar}\right), \quad (7)$$

де l_y – характерний розмір досліджуваного простору у відповідному напрямку, що визначає умову нормування хвильової функції електрона у всьому просторі системи, а

$$E_{\perp} = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y}$$

– відповідна складова енергії електрона.

Хвильова функція $\varphi(z, t)$ задовольняє рівнянню:

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{e^2 B_0^2 \cos^2 \omega t}{2m_y c^2} (z - z_0)^2 - \frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \varphi(z, t) = E_{\perp} \varphi(z, t), \quad (8)$$

в якому введено позначення

$$z_0 = -\frac{\hbar c k_y}{e B_0 \cos \omega t}.$$

Припустимо, що процес квазістаціонарний:

$$\frac{\partial \varphi(z, t)}{\partial t} = 0.$$

Тоді розв'язком рівняння (8) є функції

$$\varphi(z') = \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{m \omega_0}{\hbar} z'^2\right) H_n(z'), \quad (9)$$

де використано позначення для просторової змінної $z' = z - z_0$, а функції

$$H_n(z') = (-1)^n \exp(z'^2) \frac{d^n}{dz'^n} \exp(-z'^2),$$

тобто $H_n(z')$ – поліноми Ерміта.

Рівняння (9) співпадає з виразом для гармонічного квантового осцилятора. Тут ω_0 – власна частота осцилятора, m – маса осцилятора, які визначаються відповідно виразами:

$$\omega_0 = \frac{|B_0 e \cos \omega t|}{mc},$$

$$m = \sqrt{m_y m_z}.$$

Таким чином, циклотронна частота електрона у поперечному напрямку залежить як від інтенсивності магнітного поля, так і від його частоти.

Виходячи з виразу (7), остаточно отримуємо розв'язок для рівняння (6) :

$$\psi_{\perp}(y, z, t) = \frac{1}{\sqrt{l_y}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{m \omega_0}{\hbar} z'^2\right) H_n(z') \exp\left(ik_y y - iE_{\perp} t \frac{1}{\hbar}\right).$$

Висновки

Таким чином ми показали, що осцилююче магнітне поле орієнтоване вздовж молекулярного ланцюжка, приводить до складної динаміки Давидовського

солітона. Ця динаміка складається з осциляторної динаміки електрона у площині, поперечній напрямку ланцюжка, з циклотронною масою $m = \sqrt{m_y m_z}$ та частотою зовнішнього магнітного поля, та з когерентного руху електрона у стані вільного солітона в поздовжньому напрямку. Отже, повна хвильова функція надлишкового електрона у ланцюжку з електрон-фононою взаємодією описується добутком солітонної хвильової функції вздовж ланцюжка та хвильовими функціями осцилятора у напрямках, перпендикулярних до ланцюжка:

$$\varphi(z') = \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{m \omega_0}{\hbar} z'^2\right) H_n(z').$$

Така складна динаміка Давидовського солітона за наявності осцилюючого магнітного поля відбивається на процесах транспорту зарядів у відповідних системах, а саме на провідності молекулярних ланцюжків, таких як полідіацетилен та інші полімери. Особливого значення може мати вплив осцилюючого магнітного поля на процеси транспорту зарядів у біологічних системах, які супроводжують всі важливі біологічні процеси, як то процеси дихання та фотосинтезу. Такі процеси транспорту енергії та зарядів на певних ділянках протікають через альфа-спіральні білкові молекули, де ці заряди автолокалізуються і утворюють солітони. Отже, зовнішнє магнітне поле, спричиняючи зміну динаміки солітонів, викликати і відповідні біологічні зміни.

Перелік використаних джерел

1. Филиппов А. Т. Многоликий солитон — М. : Наука, 1990. — 288 с.
2. Захаров В. Е., Шабат А. Б. Точная теория двумерной фокусировки в одномерной автомодуляции волн в нелинейных средах — ЖЭТФ, 1971, № 61. — 118-134 с.
3. Давыдов А. С. Солитоны в молекулярных системах — К. : Наукова думка, 1988. — 304 с.
4. Aricò A. S., Bruce P., Scrosati B. and others Nanostructured materials for advanced energy conversion and storage devices — Nature Materials, 2005, v. 4 — 366-377 с.
5. Thompson S. T., Hodby E., Wieman C. E. Ultracold Molecule Production Via a Resonant Oscillating Magnetic Field — Physical Review Letters, 2005, 95, id 190404. —
6. Brizhik L. S. Bisoliton in Constant Magnetic Field — Physica Status Solidi, 1990, v. 157. — 649-655 с.
7. Brizhik L., Cruzeiro-Hansson L., Eremko A. Electromagnetic Radiation Influence on Nonlinear Charge and Energy Transport in Biosystems — Journal of Biological Physics, 1999, v. 24. — 223-232 с.
8. Давидов А. С., Кислуха Н. И. Солитоны в одномерных молекулярных цепях — ЖЭТФ, 1976, 71, № 9. — 1090-1098 с.
9. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика — М. : Наука, 1989. — 768 с.