

ВПЛИВ ОСЦИЛЮЮЧОГО МАГНІТНОГО ПОЛЯ, ПЕРПЕНДИКУЛЯРНОГО МОЛЕКУЛЯРНИМ ЛАНЦЮЖКАМ, НА ДИНАМІКУ МОЛЕКУЛЯРНИХ СОЛІТОНІВ

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

¹ Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»

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

Анотація

В даній роботі досліджується вплив осцилюючого магнітного поля, перпендикулярного до молекулярного ланцюжка, на динаміку давидовського солітона. Такий солітон утворюється в молекулярному ланцюжку внаслідок врахування електрон-фононної взаємодії та описує автолокалізований стан надлишкового електрона в деформаційному потенціалі. Показано, що в такому полі параметри молекулярного солітона, зокрема його швидкість, ширина та енергія, стають залежними від часу. Ця проблема досліджена нами в рамках методу теорії збурень для нелінійних рівнянь. Показано, що параметри солітона є осцилюючими функціями часу з частотами зовнішнього поля та вищими гармоніками.

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

Вступ

Істотну роль в низькорозмірних молекулярних системах відіграє електрон-фононна взаємодія. При помірному значенні сталої цієї взаємодії у одновимірних молекулярних ланцюжках має місце автолокалізація квазічастинки у солітонному стані [1]. А саме утворюється зв'язаний стан квазічастинки та створеної нею деформації ланцюжка (поляронний ефект). Такі молекулярні солітони називаються ще давидовськими солітонами [2]. Вони являються ефективними носіями енергії та зарядів в біологічних процесах через макромолекулярні системи (ДНК, альфа-спіральні білкові молекули), полімерах та інших низькорозмірних молекулярних сполуках.

Динаміка молекулярних солітонів істотно залежить від зовнішніх полів, зокрема від магнітного поля. Особливого значення має дослідження впливу осцилюючого магнітного поля на динаміку солітонів з врахуванням факту наявності таких полів в оточуючому середовищі та спеціального застосування слабоінтенсивних осцилюючих магнітних полів в сучасній медицині для лікування різноманітних захворювань [3]. У попередній роботі [4] нами було більш детально описано вільний молекулярний солітон та розглянуто його динаміку у магнітному полі, орієнтованому вздовж молекулярного ланцюжка. В даній роботі розглядається випадок перпендикулярного до ланцюжків магнітного поля.

1. Рівняння руху солітона в перпендикулярному магнітному полі

Автолокалізація квазічастинки (електрона, дірки, протона, молекулярного збудження) у солітонному стані можлива завдяки електрон-фононній взаємодії в низькорозмірних молекулярних системах (макромолекулах, полімерах та інших молекулярних сполуках).

Враховуючи електрон-фононну взаємодію в молекулярному ланцюжку, отримуємо такі рівняння руху для електронної та фононної підсистем:

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

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

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

Молекулярний солітон, відповідно, є розв'язком вище вказаних рівнянь.

Розглядаючи задачу в тривимірному просторі, вважаємо молекулярний ланцюг направленим по осі x . Повна хвильова функція електрона в такому випадку має дві складові: солітона у напрямку ланцюжка, та перпендикулярної складової:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_s(x, t) \psi_\perp(y, z, t). \quad (3)$$

Розглянемо рівняння (1). В загальному випадку такий гамільтоніан має вигляд:

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

^аkatyatemchenko@gmail.com

^бbrizhik@bitp.kiev.ua

Тут p_ν та A_ν – відповідні компоненти імпульсу електрона та векторного потенціалу магнітного поля, $\nu = 1, 2, 3$, $\rho(x, t)$ – деформація ланцюжка, σ – стала електрон-фононої взаємодії в ланцюжку.

Як вже було зазначено, на динамічні властивості солітонів впливають магнітні поля. В даній роботі розглянемо випадок осцилюючого магнітного поля, яке орієнтоване впоперек молекулярних ланцюжків.

Нехай поперечне магнітне поле задається виразом:

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

Обираємо таку калібровку поля, в якій векторний потенціал має вигляд:

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

Беручи до уваги, що $p_\nu = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_\nu}$ та рівняння (3), отримуємо вираз для повного гамільтоніану у вигляді суми двох доданків:

$$H_s = -\frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m_z} \left(\hbar k_z + \frac{e}{c} B_0 x \cos \omega t \right)^2 - \sigma \rho(x, t); \quad (4)$$

$$H_\perp = -\frac{\hbar^2}{2m_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2}.$$

Розглянемо розв'язок (1) для солітонної хвильової функції, гамільтоніан якої має вигляд (4):

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \sigma \rho(x, t) \right] \psi_s(x, t) = \frac{1}{2m_z} \left(\hbar k_z + \frac{e}{c} B_0 x \cos \omega t \right)^2 \psi_s(x, t). \quad (5)$$

Отримане рівняння зводимо до нелінійного рівняння Шредінгера. Для цього спочатку введемо безрозмірні величини за допомогою таких заміни:

$$\tilde{x} = \sqrt{g} \frac{x}{a}, \quad \tilde{x}_0 = \frac{\sqrt{g} \hbar k_z}{aeB_0},$$

$$\tau = 2 \frac{Jgt}{\hbar}, \quad \Omega = \frac{\omega \hbar}{2Jg},$$

де J – стала обмінної взаємодії та введено позначення для безрозмірної сталої електрон-фононої взаємодії:

$$g = \frac{\sigma^2}{2J\kappa(1-s^2)}, \quad s^2 = \frac{V^2}{V_0^2}.$$

Тут κ – константа пружності ланцюжка.

В нових змінних рівняння (5) набуває вигляду:

$$\left[i \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\sigma \rho}{2Jg} \right] \psi_s(\tilde{x}, \tau) = \varepsilon (\tilde{x} \cos \Omega \tau + \tilde{x}_0)^2 \psi_s(\tilde{x}, \tau), \quad (6)$$

g – безрозмірна стала електрон-фононої взаємодії.

Коефіцієнт ε в рівнянні (6) визначається

$$\varepsilon = \frac{e^2 B_0^2 a^2}{4m_z J c^2 g^2}$$

та може вважатись малим: $\varepsilon \ll 1$.

Шукаємо розв'язок для (2). Для цього визначимо деформацію ланцюжка $\rho(x, t)$ як суму двох доданків:

$$\rho(x, t) = \rho_0(u) + \varepsilon \rho_1(u), \quad (7)$$

де введено заміну

$$u = x - \xi(t).$$

Підставляючи вираз (7) в рівняння (2), знаходимо:

$$\rho_0(u) = \frac{\sigma}{\kappa \left(1 - \frac{V^2}{V_0^2} \right)} |\psi(u)|^2, \quad (8)$$

тут швидкість V визначається як

$$V = \frac{d\xi}{dt}, \quad \omega_0 \equiv \frac{d^2 \xi}{dt^2}$$

і $\rho_1(u)$ задовольняє рівняння:

$$\frac{d\rho_1}{du} = -\frac{\omega_0}{\varepsilon V_0^2 \left(1 - \frac{V^2}{V_0^2} \right)} \rho_0. \quad (9)$$

Підставляючи $\rho(x, t)$ в рівняння (6) остаточно отримуємо нелінійне рівняння Шредінгера з правою частиною в такому вигляді:

$$\left[i \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{1}{2} |\psi_s(\tilde{x}, \tau)|^2 \right] \psi_s(\tilde{x}, \tau) = \varepsilon \left[(\tilde{x} \cos \Omega \tau + \tilde{x}_0)^2 - \frac{\sigma}{2Jg} \rho_1(\tilde{x}, \tau) \right] \psi_s(\tilde{x}, \tau). \quad (10)$$

Зручно представити рівняння (10) у вигляді:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{1}{2} |\psi|^2 \psi = i \varepsilon R[\psi], \quad (11)$$

де введено позначення

$$R[\psi] = -i \left[(\tilde{x} \cos \Omega \tau + \tilde{x}_0)^2 - \frac{\sigma}{2Jg} \rho_1(\tilde{x}, \tau) \right] \psi. \quad (12)$$

2. Розв'язок рівнянь руху методом теорії збурень

За наявності правої частини в (11) параметри солітона стають залежними від часу. Якщо в правій частині стоїть член малий в порівнянні з основними членами нелінійного рівняння Шредінгера, то ці параметри є слабкозалежними від часу і рівняння для них можуть бути отримані з методу теорії збурень для нелінійних рівнянь. Тобто тут вважаємо істотним відмітити, що ми не користуємося методом лінеаризації нелінійних рівнянь і завдяки цьому зберігаємо солітонні властивості шуканого розв'язку. Такий метод теорії збурень для нелінійного рівняння Шредінгера був розвинутий в роботі [5]. У відповідності до [5] шукаємо розв'язок (11) у вигляді:

$$\psi_s(\tilde{x}, \tau) = 2\nu \operatorname{sech} \zeta \exp[i\varphi], \quad (13)$$

тут

$$\zeta = 2\nu (\tilde{x} - \tilde{\xi}), \quad \varphi = \frac{\mu \zeta}{\nu} + \eta.$$

Підставляючи (13) в (8) та розв'язуючи (9) отримуємо для ρ_1 :

$$\rho_1 = -\frac{4\nu \sigma \omega_0 a}{\varepsilon \sqrt{g} V_0^2 \kappa \left(1 - \frac{V^2}{V_0^2} \right)} \operatorname{th} \left[2\nu (\tilde{x} - \tilde{\xi}) \right].$$

Тоді (12) матиме вигляд:

$$R[\psi] = -2i\nu \operatorname{sech} \zeta \left[(\tilde{x} \cos \Omega\tau + \tilde{x}_0)^2 + \frac{2\nu\sigma^2\omega_0 a h \zeta}{\varepsilon J g^{3/2} V_0^2 \kappa \left(1 - \frac{V^2}{V_0^2}\right)} \right] \exp\{i\varphi\}.$$

Відповідно до теорії збурень [5], параметри ν , μ , $\tilde{\xi}$, η визначаються з наступних рівнянь:

$$\frac{d\nu}{d\tau} = \frac{\varepsilon}{2} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech} \zeta R[\psi] \exp(-i\varphi) d\zeta;$$

$$\frac{d\mu}{d\tau} = \frac{\varepsilon}{2} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sh} \zeta}{ch^2 \zeta} R[\psi] \exp(-i\varphi) d\zeta;$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{\xi}}{d\tau} = & -\frac{1}{2\nu} \operatorname{Im} \left(-2(\mu + i\nu)^2 \right) + \\ & + \frac{\varepsilon}{4\nu^2} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\zeta}{ch\zeta} R[\psi] \exp(-i\varphi) d\zeta; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{\xi}}{d\tau} = & 2\mu \frac{d\tilde{\xi}}{d\tau} + \operatorname{Re} \left(-2(\mu + i\nu)^2 \right) + \\ & + \frac{\varepsilon}{2\nu} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - \zeta th\zeta}{ch\zeta} R[\psi] \exp(-i\varphi) d\zeta. \end{aligned}$$

Розв'язуючи рівняння для параметрів отримуємо такі розв'язки:

$$\begin{cases} \nu = C_1, \\ \tilde{\xi} = 2\mu\tau + C_2, \\ \mu = -\varepsilon \left(\frac{\tilde{\xi}}{2\Omega} (\Omega\tau + \sin \Omega\tau \cos \Omega\tau) - \right. \\ \left. - \frac{\tilde{x}_0}{\Omega} \sin \Omega\tau + \frac{2}{3} \nu\tau\alpha \right) + C_3, \\ \eta = 2\tau (\nu^2 + \mu^2) + \varepsilon \left(\frac{\pi^2}{48\Omega\nu^2} - \frac{\tilde{\xi}^2}{\Omega} \right) \left(\frac{\Omega\tau}{2} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sin \Omega\tau \cos \Omega\tau \right) + \frac{2\varepsilon\tilde{\xi}\tilde{x}_0}{\Omega} \sin \Omega\tau - \varepsilon\tau\tilde{x}_0^2 + C_4. \end{cases}$$

Тут C_1 , C_2 , C_3 , C_4 – константи інтегрування,

$$\alpha = \frac{2\nu\sigma^2\omega_0 a}{\varepsilon\kappa J g^{3/2} (V_0^2 - V^2)}.$$

Остаточно отримуємо розв'язок рівнянь руху у вигляді:

$$\psi_s(\tilde{x}, \tau) = 2\nu \operatorname{sech} \left(2\nu (\tilde{x} - \tilde{\xi}) \right) \exp \left[2i\mu (\tilde{x} - \tilde{\xi}) + i\eta \right],$$

в якому

$$\nu = C_1,$$

$$\tilde{\xi} = \frac{2\tau\varepsilon \left(\frac{\tilde{x}_0}{\Omega} \sin \Omega\tau - \frac{2}{3}\tau\alpha_1 \right) + 2\tau C_3 + C_2}{1 + \frac{\varepsilon\tau}{\Omega} (\Omega\tau + \sin \Omega\tau \cos \Omega\tau)},$$

$$\begin{aligned} \mu = & -\varepsilon \left(\frac{\frac{\tau\varepsilon}{\Omega} \left(\frac{\tilde{x}_0}{\Omega} \sin \Omega\tau - \frac{2}{3}\tau\alpha_1 \right) + \tau C_3 + \frac{C_2}{2}}{1 + \frac{\varepsilon\tau}{\Omega} (\Omega\tau + \sin \Omega\tau \cos \Omega\tau)} \left(\Omega\tau + \right. \right. \\ & \left. \left. + \sin \Omega\tau \cos \Omega\tau \right) - \frac{\tilde{x}_0}{\Omega} \sin \Omega\tau + \frac{2}{3}\tau\alpha \right) + C_3, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \eta = & 2\tau (\nu^2 + \mu^2) + \varepsilon \left(\frac{\pi^2}{48\Omega\nu^2} - \frac{\tilde{\xi}^2}{\Omega} \right) \left(\frac{\Omega\tau}{2} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \sin \Omega\tau \cos \Omega\tau \right) + \frac{2\varepsilon\tilde{\xi}\tilde{x}_0}{\Omega} \sin \Omega\tau - \varepsilon\tau\tilde{x}_0^2 + C_4. \end{aligned}$$

Висновки

Таким чином ми показали, що осцилююче магнітне поле, направлене перпендикулярно до ланцюжків, має істотний вплив на динаміку давидовських солітонів. Зокрема, параметри солітонів задаються функціями, що істотно залежать від часу та містять гармоніки з частотою зовнішнього поля та кратними їй. Солітон набуває залежного від часу прискорення, що істотним чином має відбитися на процесах електронної провідності та процесах перенесення енергії та зарядів у біологічних системах. Цим може пояснюватися механізм терапевтичної дії низькочастотних магнітних полів. Ці результати також вказують на можливість впливу магнітного поля на процеси запису та зберігання інформації в елементах пам'яті з використанням низькорозмірних молекулярних сполук та процесів транспорту зарядів в приладах мікро- та наноелектроніки.

Перелік використаних джерел

1. Давыдов А. С. Солитоны в молекулярных системах — К. : Наукова думка, 1988. — 304 с.
2. Scott A. C. Davydov's soliton — Physics Reports, 1992, v. 217 — 1-67 с.
3. 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.
4. Темченко К. В., Брижик Л. С. Динаміка давидовського солітона в осцилюючому магнітному полі, спрямованому вздовж молекулярного ланцюжка — Доповідь на цій конференції, 2016. — 223-232 с.
5. Захаров В. Е., Шабат А. Б. Точная теория двумерной фокусировки в одномерной автомодуляции волн в нелинейных средах — ЖЭТФ, 1971, № 61. — 118-134 с.