

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
ІМЕНІ ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»**

Фізико – технічний інститут
Кафедра прикладної фізики

«На правах рукопису»
УДК 538.935

«До захисту допущено»
Завідувач кафедри

_____ (підпис) _____ (ініціали, прізвище)

“ ____ ” _____ 20__ р.

Магістерська дисертація

на здобуття ступеня магістра

зі спеціальності 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»

на тему: Вплив змінного магнітного поля на динамічні властивості поляронів у
низькорозмірних системах

Виконала: студентка 6 курсу, групи ФФ-61м

Темченко Катерина Володимирівна

_____ (підпис)

Науковий керівник: провідний науковий співробітник лабораторії
сильнокорельованих низькорозмірних систем Інституту
теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, доктор
фіз.-мат. наук, старший науковий співробітник, Брижик Л. С. _____

_____ (підпис)

Рецензент: провідний науковий співробітник лабораторії
сильнокорельованих низькорозмірних систем Інституту
теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, доктор
фіз.-мат. наук, Єремко О. О. _____

_____ (підпис)

Рецензент: провідний науковий співробітник відділу синергетики
Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
доктор фіз.-мат. наук, Єрмаков В. М. _____

_____ (підпис)

Засвідчую, що у цій магістерській дисертації
немає запозичень з праць інших авторів без
відповідних посилань.

Студент _____

(підпис)

Київ – 2018 рік

**Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»**

Фізико-технічний інститут

Кафедра прикладної фізики

Рівень вищої освіти – другий (магістерський)

Спеціальність 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» _____
(код і назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ
Завідувач кафедри

_____ (підпис) _____ (ініціали, прізвище)

«___» _____ 20__ р.

**ЗАВДАННЯ
на магістерську дисертацію студенту
Темченко Катерина Володимирівна**

1. Тема дисертації: «Вплив змінного магнітного поля на динамічні властивості поляронів у низькорозмірних системах»

науковий керівник дисертації: Брижик Лариса Свиридівна, доктор фіз.-мат. наук, старший науковий співробітник

затверджені наказом по університету від «___» _____ 20__ р. № _____

2. Термін подання студентом дисертації: 14 травня 2018 р.

3. Об'єкт дослідження: нелінійні механізми транспорту зарядів у низьковимірних системах

4. Предмет дослідження: вплив зовнішнього змінного магнітного поля на динаміку давидовських солітонів

5. Перелік завдань, які потрібно розробити:

1) ознайомитися з літературою з питання впливу зовнішніх полів на давидовські солітони;

2) записати гамільтоніан та вивести рівняння руху для солітона у магнітному полі;

3) розв'язати відповідні рівняння руху та на їх основі зробити аналіз наслідків зміни динамічних властивостей солітонів, зумовлених зовнішнім полем.

6. Орієнтовний перелік ілюстративного матеріалу: обсяг роботи – 80 сторінок; кількість рисунків та графіків – 9.

7. Орієнтовний перелік публікацій:

1) Давидовський солітон в зовнішньому магнітному полі: роль деформації ланцюжка — Стаття в матеріалах XV Наукової конференції студентів, аспірантів та молодих вчених на базі Фізико-технічного інституту НТУУ «КПІ», 2018.

2) Effects of magnetic field on large polarons in low-dimensional nanosystems — Тези доповіді на міжнародну конференцію The 4th edition of Nanotech France 2018 International Conference and Exhibition, Paris, 27-29th Jun, 2018.

3) Davydov's soliton in oscillating magnetic field — Тези доповіді на міжнародну конференцію International Conference on Nonlinear Mathematics and Physics, Málaga, 12-15th Jun, 2018.

8. Консультанти розділів дисертації*

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв

9. Дата видачі завдання: 01 лютого 2018 р.

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Термін виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1	Огляд літератури з теорії молекулярних солітонів та їх застосувань у фізиці та біофізиці наносистем	12.02.17-30.06.17	
2	Виведення рівняння руху електросолітона у молекулярному ланцюжку під впливом зовнішнього періодичного магнітного поля з урахуванням реакції ґратки ланцюжка на зміну електронної складової солітона	05.09.17-20.09.17	
3	Вибір методу розв'язку отриманих рівнянь	21.09.17-04.10.17	

* Консультантом не може бути зазначено наукового керівника магістерської дисертації.

4	Розрахунок перенормування динамічної маси електросолітона (полярона великого радіусу) у молекулярному ланцюжку в зовнішньому періодичному магнітному полі.	07.10.17-07.11.17	
5	Розрахунок циклотронної частоти електросолітона у зовнішньому періодичному магнітному полі	09.11.17-20.12.17	
6	Аналіз характеру впливу зовнішнього поля на динамічні властивості полярона	05.02.18-25.02.18	
7	Оцінка випромінювання електросолітоном делокалізованих затухаючих акустичних хвиль, зумовленого осцилюючим рухом електросолітона	28.02.18-09.03.18	
8	Розрахунок параметрів солітона з врахуванням ефектів дисипації енергії в магнітному полі	10.03.18-31.03.18	
9	Оформлення отриманих результатів	01.04.18-05.05.18	

Студент

(підпис)

(ініціали, прізвище)

Науковий керівник дисертації

(підпис)

(ініціали, прізвище)

РЕФЕРАТ

Актуальність теми. В даній роботі вивчаються динамічні властивості давидовських солітонів (поляронів великого радіусу) у зовнішньому періодичному в часі магнітному полі. Солітони утворюються в молекулярних низькорозмірних системах з урахуванням електрон-фононої взаємодії, внаслідок якої має місце автолокалізація носіїв заряду у створеному ними деформаційному потенціалі. Низькорозмірні молекулярні системи (електропровідні органічні та неорганічні сполуки, білкові молекули, ДНК) належать до класу наноматеріалів і завдяки своїм унікальним властивостям знаходять застосування в сучасних нанотехнологіях та відіграють важливу роль у біологічних процесах.

Особливого значення має дослідження впливу осцилюючого магнітного поля на динаміку солітонів з огляду на присутність магнітних полів у зовнішньому середовищі та застосування низькоінтенсивних магнітних полів в медицині.

Дана робота є теоретичним дослідженням, виконаним у лабораторії сильнокорельованих низьковимірних систем відділу теорії нелінійних процесів в конденсованих середовищах Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України протягом лютого 2017 – травня 2018 року.

Робота виконана в рамках **державної цільової програми за відомчою тематикою НАН України** «Термодинамічні, кінетичні та транспортні властивості низьковимірних систем за наявності зовнішніх полів і структурної неупорядкованості» (2017-2021 рр.), реєстраційний номер 0117U00236.

В даній роботі досліджується **проблема** впливу зовнішніх магнітних полів на нелінійні процеси транспорту зарядів.

Предмет дослідження – вплив зовнішнього змінного магнітного поля на динаміку давидовських солітонів.

Об'єктом досліджень є нелінійні механізми транспорту зарядів у низьковимірних системах.

Мета дослідження – розрахунок динамічних параметрів солітонів у періодичному в часі магнітному полі.

В роботі виведено гамільтоніан солітона у зовнішньому магнітному полі та отримані динамічні рівняння. Для їх розв'язку використано **метод** теорії збурень, заснований на оберненій задачі розсіювання Захарова-Шабата для солітонів. Дана теорія дозволяє описати еволюцію солітонів, що знаходяться під дією слабких регулярних збурень. Розв'язки рівнянь, які допускають інтегрування методом оберненої задачі розсіювання, показують, що деяке початкове збудження еволюціонує у часі у суперпозицію квазілінійних збуджень і усамітнених хвиль – солітонів. Розвинена техніка дозволяє знайти залежність від часу параметрів солітонів в адіабатичному наближенні і побудувати поправки за рахунок вищих порядків теорії збурень.

Незважаючи на актуальність поставленої задачі, динаміка солітонів у змінному в часі магнітному полі **досі не досліджувалася**, на відміну від сталого магнітного поля. Особливе значення має зміна динамічної маси солітона, її залежність від частоти та інтенсивності зовнішнього поля та додаткове випромінювання солітоном згасаючих у часі та просторі звукових та електромагнітних хвиль. Ці зміни відбиваються на загальних характеристиках процесів транспорту зарядів у наносистемах. Отримані результати також вказують на можливість пояснення терапевтичної дії магнітних полів, механізми якої **на даний час не встановлені**.

Зокрема показано, що зміна параметрів електронної компоненти солітона призводить і до зміни деформації ланцюжка. Реакція ґратки молекулярного ланцюжка на зміну електронної складової солітона має різний характер в

залежності від положення самого солітона. Крім того, вона залежить також і від амплітуди та частоти зовнішнього поля.

Координата центру мас солітона задовольняє рівняння руху типу рівняння Ньютона під дією зовнішньої періодичної сили, а динамічна маса солітона стає залежною від амплітуди і частоти магнітного поля також. Динамічна маса солітона відрізняється від маси вільного солітона та від циклотронної маси електрона.

Показано, що у змінному магнітному полі солітон випромінює звукові та електро-магнітні хвилі малої амплітуди, згасаючи у часі та просторі. При цьому випромінювання йде як у прямому, так і у зворотньому до руху солітона напрямку.

Показано наявність характеристичної частоти солітона, по відношенню до якої вплив магнітного поля відрізняється для низькочастотного та високочастотного режимів.

Врахування дисипації енергії приводить до модифікації залежності параметрів солітона від часу в поперечному магнітному полі. Солітон за рахунок зміни параметрів випромінює хвилі, втрачаючи таким чином енергію і гальмуючи.

Такий складний вплив на динаміку солітонів відображається на зміні процесів транспорту електронів у низькорозмірних молекулярних системах та молекулах.

Дана робота пройшла апробацію отриманих результатів у відділі теорії нелінійних процесів у конденсованих середовищах Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України. Її результати доповідалися на XV Науковій конференції студентів, аспірантів та молодих вчених на базі Фізико-технічного інституту НТУУ «КПІ» [1] та подані тези на міжнародні конференції:

- The 4th edition of Nanotech France 2018 International Conference and Exhibition, Paris, 27-29th Jun, 2018;
- International Conference on Nonlinear Mathematics and Physics, Málaga, 12-15th Jun, 2018.

Ключові слова: наносистеми, низькорозмірні молекулярні системи, нелінійні механізми транспорту зарядів, давидовський солітон, осцилююче магнітне поле, теорія збурень, метод оберненої задачі розсіяння.

ABSTRACT

Actuality of theme. In this work we study the dynamic properties of Davydov's solitons (polarons of large radius) in an external periodic magnetic field in time. Solitons are formed in molecular low-dimensional systems, taking into account the electron-phonon interaction, as a result of which the self-localization of charge takes place in the deformation potential created by them. Low-dimensional molecular systems (conductive organic and inorganic compounds, protein molecules, DNA) belong to the class of nanomaterials and due to their unique properties are used in modern nanotechnologies and play an important role in biological processes.

Of particular importance is the study of the influence of the oscillating magnetic field on the dynamics of solitons in view of the presence of magnetic fields in the external environment and the use of low-intensity magnetic fields in medicine.

This work is a theoretical study performed in the laboratory of strongly correlated low-dimensional systems of the department of the theory of nonlinear processes in condensed media at the Institute of Theoretical Physics. M. Bogolyubov NAS of Ukraine during February 2017 - May 2018.

The work was carried out within the framework of the state target **program for departmental subjects of the National Academy of Sciences of Ukraine** "Thermodynamic, kinetic and transport properties of low-dimensional systems in the presence of external fields and structural disorder" (2017-2021 biennium), registration number 0117U00236.

In this paper, the **problem** of the influence of external magnetic fields on the nonlinear transport processes of charges is investigated.

The subject of the study is the influence of the external alternating magnetic field on the dynamics of the Davydov solitons.

The object of research is the nonlinear mechanisms of transport of charges in low-dimensional systems.

The purpose of the study is to calculate the dynamic parameters of solitons in a periodic magnetic field.

The soliton Hamiltonian in an external magnetic field is derived and the dynamic equations are derived. For their solution, the perturbation theory **method** is used, which is based on the inverse Zakharov-Shabat scattering problem for solitons. This theory allows us to describe the evolution of solitons, which are under the influence of weak regular perturbations. Solutions of equations that allow integration with the inverse scattering method show that some initial excitation evolves over time into a superposition of quasilinear excitations and solitary waves solitons. The developed technique allows us to find the dependence on the time of the soliton parameters in the adiabatic approximation and to construct the corrections at the expense of higher orders of the theory of perturbations.

Despite the relevance of the problem, the dynamics of solitons in a time-varying magnetic field has not yet been investigated, in contrast to the stable magnetic field. Particular importance is the change in the dynamic mass of the soliton, its dependence on the frequency and intensity of the external field, and the additional radiation by the soliton of the time and space extinguishing of sound and electromagnetic waves. These changes are reflected in the general characteristics of charge transport processes in nanosystems. The obtained results also indicate the possibility of explaining the therapeutic effect of magnetic fields, the mechanisms of which are not currently established.

In particular, it was shown that the change in the parameters of the electronic component of the soliton leads to a change in the deformation of the chain. The reaction of the lattice of the molecular chain to the change of the electronic component of the soliton has a different character depending on the position of the soliton itself. In addition, it also depends on the amplitude and frequency of the external field.

The coordinate of the center of mass of the soliton satisfies the equations of motion of the type of the Newton equation by the action of the outer periodic force, and the dynamical mass of the soliton becomes dependent on the amplitude and

frequency of the magnetic field as well. The dynamic mass of the soliton differs from the mass of the free soliton and the cyclotron mass of the electron.

It is shown that in a changeable magnetic field, the soliton emits sound and electromagnetic waves of small amplitude, fading in time and space. In this case, the radiation goes both in direct and in reverse to the motion of the soliton direction.

The presence of the characteristic frequency of a soliton is shown, in relation to which the influence of the magnetic field differs for low-frequency and high-frequency modes.

The account of energy dissipation results in the modification of the dependence of the soliton parameters on time in a transverse magnetic field. Soliton, by changing parameters, emits waves, thus losing energy and braking.

Such a complex effect on the dynamics of solitons is reflected in the change of electron transport processes in low-dimensional molecular systems and molecules.

Results of this work **were approved** at the Department of the theory of nonlinear processes in condensed matter in Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine. Its results were reported at the XV Scientific Conference of students, postgraduates and young scientists on the basis of the Institute of Physics and Technology of NTUU "KPI" [3] and presented the thesis for international conferences:

- The 4th edition of Nanotech France 2018 International Conference and Exhibition, Paris, 27-29th Jun, 2018;
- International Conference on Nonlinear Mathematics and Physics, Málaga, 12-15th Jun, 2018.

Keywords: nanosystems, low-dimensional molecular systems, nonlinear charge transport mechanism, Davydov soliton, oscillating magnetic field, perturbation theory, the method of inverse scattering method.

ЗМІСТ

ВСТУП	13
РОЗДІЛ 1. Давидовський солітон.....	26
1.1. Давидовський солітон.....	27
1.2. Рівняння руху та загальні властивості давидовського солітона.....	35
Висновки до розділу 1	38
РОЗДІЛ 2. Давидовський солітон у магнітному полі.....	39
2.1. Однокомпонентний солітон у магнітному полі	39
2.2. Солітон у поперечному магнітному полі.....	41
Висновки до розділу 2	44
РОЗДІЛ 3. Двокомпонентний давидовський солітон у магнітному полі.....	45
3.1. Динамічні рівняння солітона у магнітному полі.....	45
3.2. Адіабатичне наближення (теорія збурень для солітонів)	48
3.3. Залежність параметрів солітона від часу	54
3.4. Динамічна маса солітона у змінному магнітному полі	55
3.5. Випромінювання солітоном, зумовлене магнітним полем.....	57
Висновки до розділу 3	62
РОЗДІЛ 4. Врахування ефектів дисипації енергії солітона в магнітному полі ..	64
4.1. Моделювання молекулярного ланцюжка з надлишковим електроном за відсутності зовнішнього магнітного поля	64
4.2. Нелінійне рівняння Шредінгера з дисипацією енергії	66
4.3. Рівняння руху солітона в магнітному полі з врахуванням дисипації енергії	68
Висновки до розділу 4	72
ВИСНОВКИ.....	73
СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ	77

ВСТУП

Опис різноманітних явищ природи не завжди можливо здійснити за допомогою лінійних рівнянь. Всі реальні фізичні системи нелінійні і їх можна вважати лінійними лише наближено – при малій інтенсивності коливальних і хвильових процесів. Крім того, кожна нелінійна задача має власні характерні особливості і потребує особливих та зазвичай досить складних математичних методів. Задачі сучасної фізики потребують точних результатів з врахуванням все більш тонких деталей досліджуваних процесів. Особливістю нелінійного опису є врахування нелінійної залежності відгуку системи від зовнішніх збурень.

Часто при вивченні процесів нелінійність вважають слабкою, що дозволяє отримати результати використовуючи теорію збурень. Такий підхід справедливий тільки якщо порядок збудження системи можна вважати малим. Якщо порядок не є малим, тобто внесок нелінійності є суттєвим, то розв'язувати задачу за допомогою лінеаризованих рівнянь неправильно. З іншого боку, далеко не для кожної нелінійної системи можна отримати розв'язок. Незважаючи на складність таких систем, виділяють так звані точно інтегровані рівняння, властивістю яких є існування точного розв'язку. Для таких рівнянь застосовують метод оберненої задачі розсіювання, який дозволяє отримати досить точні аналітичні результати для нелінійних систем з часовою еволюцією.

Виникнення таких солітонних розв'язків можна пояснити наступним чином. Якщо у нас є деяка система, яку можемо описати хвильовими рівняннями, то нелінійність такої системи буде збільшувати дисипацію, генеруючи гармоніки вищих порядків, з більшими хвильовими числами. Якщо середовище диспергуюче, тобто фазова швидкість хвиль залежить від їх

довжини, хвильовий пакет з часом розповзається, втрачаючи таким чином свою енергію. Характерною особливістю диспергуючих середовищ є більший рівень коливань, ніж в недиспергуючих, що дозволяє встановити для деяких коливань рівновагу між нелінійністю та дисперсією. Тоді виникають так звані «усамітнені хвилі».

Солітон - це поодиноке, локалізоване в просторі збурення середовища у вигляді хвилі, що розповсюджується в ній як квазічастинка. Термін солітон походить від латинського слова *solus*, що можна перевести як «відокремлений». Характерними особливостями солітонов є локалізація в кінцевій області і незмінність форми при русі. Солітони мають енергію, імпульс, момент імпульсу. Саме ця обставина дозволяє розглядати солітони як квазічастинки, що характеризуються певними енергією і імпульсом, рух яких підпорядковується законам Ньютона [2].

Здатність солітонів зберігати свою форму при русі в середовищі з дисперсією принципово відрізняє їх від звичайних локальних збуджень. Форма солітона в нелінійному середовищі визначається двома конкуруючими процесами - розпливання через дисперсію середовища і перекиданням наростаючого фронту через нелінійність. Схематично звичайна дисипативна хвиля і солітон представлені на рис. 1, а і б, відповідно, в координатах A (амплітуда), χ (координата), t (час).

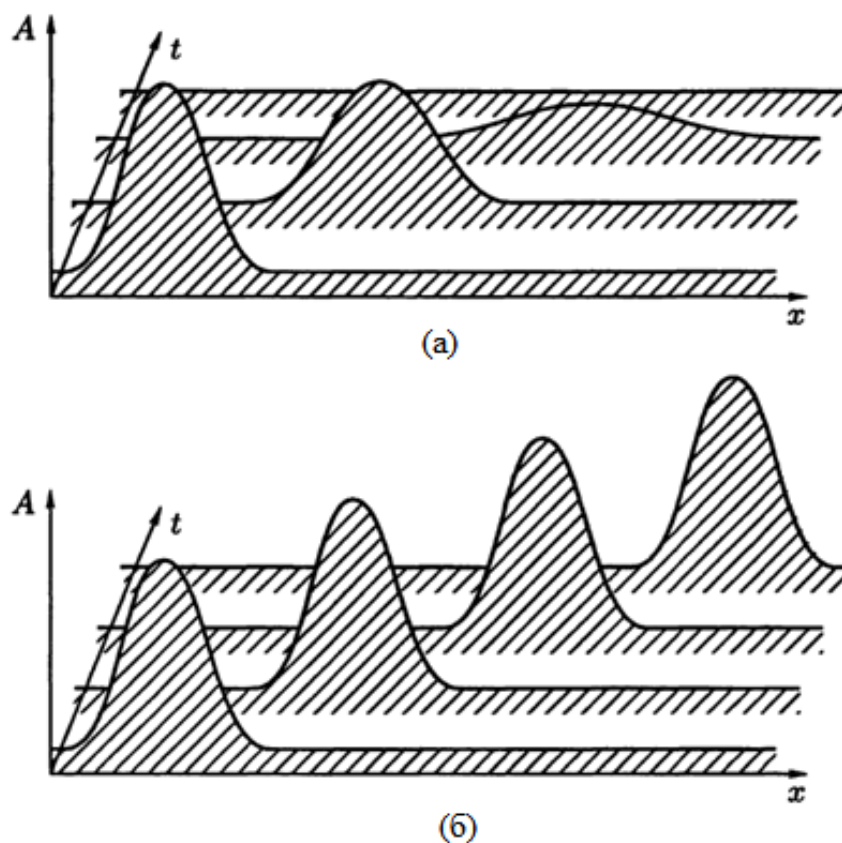


Рис.1 Схематичне зображення звичайної дисипативна хвилі (а) і солітона (б)

Здатність солітона зберігати свою форму пов'язана з тим, що солітон є нелінійним збудженням. Як відомо, при нелінійності форма і швидкість поширення збудження залежать від його амплітуди. Зазвичай, чим більше амплітуда збудження, тим більше його швидкість. В результаті нелінійності коливань передній фронт збудження при його русі стає все більш крутим. У той же час завдяки дисперсії збудження розмивається, тобто його фронт стає більш пологим. Солітон виникає за умови, що ефекти нелінійності і дисперсії компенсують один одного так, що форма імпульсу залишається незмінною у часі.

Солітони можуть утворюватися у випадках, якщо амплітуда збудження є досить велика або в системах з нелійними властивостями (наприклад нелінійні оптичні волокна, плазма, деформаційно м'які низькорозмірні молекулярні сполуки). Якщо форма і амплітуда звичайної хвилі, наприклад

хвилі, що розповсюджується по струні, визначається початковими умовами і може бути будь-яка, а її швидкість завжди одна і та ж, то можливість еволюції початкового збудження у солітон або багатосолітонний розв'язок та їх параметри, залежать як від початкових умов, так і від умов взаємної компенсації ефектів нелінійності і дисперсії, тобто параметрів системи. Можна сказати, що солітон формується і самоорганізується таким чином, щоб його форма, амплітуда і швидкість повністю компенсували дисперсійне розмиття в середовищі. Солітон, завдяки нелінійності, як би пристосовується до дисперсії і залишається навіть при наявності тертя, хоча, природно, амплітуда солітону при цьому зменшується.

Якщо енергія збудження велика, то утворюється кілька солітонів з характерними енергіями, а зайва енергія, що перевищує енергію утворення солітонів, йде на генерацію збуджень звичайного типу, що розпливаються в часі та просторі.

В даний час відомий цілий ряд систем, що допускають солітонні розв'язки, які розрізняються як за своєю природою, так і за розмірами області локалізації. Це солітони в кристалах, магнітних матеріалах, надпровідниках, в рідкому гелії, в живих організмах, атмосфері Землі і навіть в галактиках.

Солітони переносять масу, заряд, магнітний момент або енергію деякого збудження, тобто вони несуть інформацію про нелінійне середовище. При взаємодії одне з одним, солітони зберігають свою стабільність. Саме велика стабільність є основною причиною великої кількості досліджень солітонів для пояснення численних нових явищ в різних областях наук, зокрема фізики конденсованого стану.

Для того, щоб можна було описати динаміку солітонів в реальних системах, необхідний розвиток відповідного математичного апарату і зокрема теорії збурень для солітонів. В даний час побудовано теорію збурень, що дозволяє описати еволюцію солітонів, що знаходяться під дією слабких

регулярних збурень. Основна ідея полягає у використанні методу оберненої задачі розсіювання.

У 1967 році Гарднер, Грін, Круськала і Міура [3] знайшли метод інтегрування нелінійного рівняння Кортевега-де Фріза за допомогою оберненої задачі теорії розсіювання. У 1968 році Лаку [4] істотно узагальнив їх ідеї, а в 1971 Захаров і Шабат [5] застосували цей метод до іншого важливого для фізичних процесів рівняння - нелінійного рівняння Шредінгера. Після чого розвиток методу оберненої задачі теорії розсіювання і його додатків пішло з наростаючою швидкістю і привело в даний час до створення цілої галузі математичної фізики.

Для рівнянь, які можна інтегрувати методом оберненої задачі розсіювання, характерна наявність результату, який показує, що деяке локалізоване початкове збудження можна описати як суперпозицію квазілінійних збуджень і усамітнених хвиль – солітонів. Розвинена техніка дозволяє знайти еволюцію параметрів в адіабатичному наближенні і побудувати поправки за рахунок вищих порядків теорії збурень.

Багато біологічних процесів пов'язані зі зберіганням і просторовою передачею енергії та заряду у клітинах. Білки є основними для функціонування клітин: вони транспортують молекули з однієї частини клітини в іншу, каталізують реакції, передають сигнали і забезпечують базову структуру. Нещодавно була висунута гіпотеза [6], що можливість згортання і функціонування білка включає в себе перший крок, в якому енергія зберігається у формі коливань збуджених станів. Біологічна роль коливальних збуджених станів вперше була запропонована Маккларе як можлива відповідь на так звану біоенергетичну кризу [7]. Пропозицію Маккларе прийняв Давидов, який на її основі пояснив конформаційні зміни, що відповідають за скорочення м'язів [8, 9], де тригер - це енергія, виділена під час гідролізу аденозинтрифосфату (АТФ). Припущення Давидова полягало в тому, що першою подією після гідролізу АТФ є збереження енергії, що виділяється

хімічною реакцією у коливальному режимі пептидної групи, відомому як амід I коливання. У моделі Давидова [9, 10] взаємодія амід I з водневими зв'язками білкової молекули призводить до локалізації збудження амиду в декількох амінокислотах, так як взаємодія електрона з фононними модами поляризуючого кристала призводить до полярону. Дійсно, так само як електрон породжує збудження (фононні моди), що, в свою чергу, призводить до локалізованого, нижчого енергетичного стану для електрона, в моделі Давидова амід I коливання породжує збудження пов'язаних з ним водневих зв'язків, які, у свою чергу, локалізують амід I коливання. В обох випадках ми говоримо, що має місце самозахоплений стан (амід I або електрон). Поки дослідження Давидова були зосереджені на континуальній моделі водневих зв'язкових ланцюгів, які стабілізують білкові α -білки, чисельні дослідження Скотта та його колег проводилися для дискретних систем, що описують білки більш реалістично [11]. Аналітичні результати Давидова [9, 10] та численне моделювання Скотта та співробітників вказують на те, що стан, що складається з амід I коливання та пов'язаної з ним деформації водневого зв'язку, є автолокалізованим станом, відомим в літературі як давидовський солітон, стабільний при низьких температурах.

Аналогічно, автолокалізація електронів у солітонному стані має місце в широкому класі низькорозмірних молекулярних наносполук, що характеризуються помірною сталою електрон-фононної взаємодії, наприклад, у полідіацетилені.

Протягом останніх десятиліть велика увага привернута до експериментальних та теоретичних досліджень процесів транспорту зарядів у наносистемах з урахуванням зовнішніх високочастотних електромагнітних випромінювань та можливих біофізичних наслідків таких випромінювань. З одного боку, зі збільшенням використання та типів електричних приладів у повсякденному житті та сучасних технологіях, проблема їх впливу на здоров'я та, відповідно, проблема науково обґрунтованих стандартів безпеки стають все

більш важливими. З іншого боку, застосування сучасних методів мікрохвильової терапії постійно зростає в сучасній медицині для діагностики та лікування широкого спектра захворювань. Тим часом ці методи ґрунтуються лише на емпірично виявлених біологічних ефектах електро-магнітного випромінювання ультрависокої частоти. Крім того, такі ефекти можуть бути як корисними, так і згубними, і їх ступінь залежить не тільки від експозиційної дози, але також від довжини хвилі електро-магнітного випромінювання. Хоча існує декілька гіпотез про можливий резонансний вплив електро-магнітного випромінювання на біосистеми [12], механізми нетермічних біологічних ефектів електро-магнітного випромінювання залишаються остаточно не встановленими. Це багато в чому пов'язано зі складним характером біологічних процесів та їх різноманітністю в живих системах. Вся ієрархія цих процесів ґрунтується на електромагнітних взаємодіях і, таким чином, чутлива до зовнішнього електро-магнітного поля. Це включає в себе безпосередній вплив електро-магнітного випромінювання на транспортування іонів в мембранах, транспортування заряду в макромолекулах, вільні радикали, молекулярну динаміку тощо. Завдяки цим первинним процесам всі основні біохімічні і біофізичні процеси та метаболізм цілих клітин та організмів чутливі до електро-магнітного поля [13].

Задача впливу електромагнітних полів на солітони актуальна також з огляду на те, що, як показали численні теоретичні розрахунки і експериментальні дослідження, солітони існують в різноманітних фізичних системах: в оптичних середовищах, плазмі, поверхневих хвилях на воді, пружних середовищах, в атмосфері, низькорозмірних молекулярних системах та ін. Солітони можуть грати фундаментальну роль в різних областях фізики, біології та інших галузях науки і техніки [14, 15].

В роботі [16] розглядається сучасний стан моделі Давидова-Скотта для передачі енергії в білках. Описуються проблеми температурної динаміки та повних квантових і змішаних квантово-класичних наближень, а також останні

результати, отримані в кожному з цих наближень. Розраховано спектри поглинання, які показують таку ж температурну залежність, що і в кристалічному ацетаніліді. Наведено майбутні застосування моделі Давидова-Скотта.

У роботі [17] досліджується динаміка узагальненої моделі Давидова, отриманої від нескінченного ланцюга молекул альфа-спірального білка. Завдяки введенню допоміжної функції отримується білінійна форма, одно-, дво- та трисолітонні розв'язки для узагальненої моделі Давидова. Розповсюдження та взаємодія солітонів досліджено аналітично та графічно. Представлені випередження та взаємодії зіткнення двох та трьох солітонів. Очікується, що результати, отримані у цьому дослідженні, матимуть потенційне застосування в альфа-спіральних білках.

Тонкі механізми взаємодії слабого електромагнітного випромінювання з інформаційними структурами живих клітинних нуклеїнових кислот, білків та мембран розглядаються в [18]. Особлива увага приділяється механізму дії електромагнітного випромінювання міліметрового діапазону. Запропоновано фізико-математичні моделі впливу такого випромінювання на біосистему. Представлені дані про нелінійну динаміку біомакромолекул, зокрема, обговорюється механізм солітона Давидова для передачі енергії в білкових молекулах. Розглянуто процеси формування солітону в полінуклеотидах та автосолітонах у біосистемах. Виявлена вирішальна роль когерентних ефектів при збудженні вибраних колективних мод у біомакромолекулах білків та ДНК. Розглянуто кілька способів збудження рівнів колективних мод. Спільною рисою запропонованих методів є можливість придушення ангармонічності і, отже, порушення квантових рівнів, що полегшує перетин потенціального бар'єру та перенесення молекули в новий конформаційний стан. Розглянуто проблему взаємодії електромагнітного випромінювання з біополімерним ланцюгом; показано, що резонанси мають колективний характер.

Взаємодія солітонів із складними біологічними явищами, такими як клітинна самоорганізація, розглядається в роботі [19]. Солітонна модель здатна описати спектр методів електромагнетизму, які можуть бути застосовані для розуміння фізичних принципів біологічних ефектів у живих клітинах, викликаних ендогенними та екзогенними електромагнітними полями. Запропоновано модель біосолітону, яка дозволяє прогнозувати, які власні частоти нетермічних електромагнітних хвиль підтримують життя і, навпаки, шкідливі для живих клітин. Особливий ефект має діапазон власних частот електромагнітної хвилі від 0,1 Гц до петагерц, які мають спектр з 12 смуг, і можуть бути розташовані на шкалі акустичних базових частот. Модель обґрунтована мета-аналізом біологічних електромагнітних експериментів, в яких спектр електромагнітних хвиль впливає на клітини та організми. Ці дані підтверджують концепцію когерентних квантових електромагнітних станів у живих організмах та теорії Фрьоліха, Давидова та Панга. Передбачається, що раціональне управління формою солітонних хвиль, пов'язане з морфогенетичним полем та параметричним резонансом, забезпечує позиційну інформацію та сигнали для регулювання властивостей систем, в тому числі анатомічних та репродуктивних.

Виявлено фізичні та біологічні аргументи для гіпотези про те, що канцерогенез вписується в частотну схему електромагнітних хвиль, в яких відбувається поступова втрата клітинної організації [20]. Виявлено, що рак може бути ініційований і розповсюджений на типовій частоті електромагнітних хвиль, розташованих у некогерентних солітонних частотних зонах. На відміну від цього, генерація ознак раку може бути пригніченою та затриманою шляхом застосування когерентних частот солітонів. Ця гіпотеза була обґрунтована 200 різними даними про частоту електромагнітних хвиль в 320 різних опублікованих біомедичних дослідженнях. Усі частоти, починаючи від субгерца до пета-герца, можуть бути нормалізовані до 12 основних корисних (проти ракових) частот і 12 основних шкідливих частот, які порушують

когерентність. Можна очікувати пригнічення процесу раку та навіть виліковування хвороби під впливом когерентних електромагнітних полів. Такі смуги когерентних частот солітонів можуть бути реалізовані, наприклад, в терапевтичній технології випромінювання. Запобігання та затримка процесу раку можуть відбуватися шляхом стабілізації виявлених власних частот, характерних для правильного функціонування живих клітин. Дану гіпотезу можна розглядати як подальшу розробку теорії, представленої Фрьоліхом у 1968 р., і його постулатом про те, що біологічні системи демонструють когерентні поздовжні коливання електрополяричних макромолекулярних структур. Конденсація диполів Фрьоліха, що зумовлюють електромагнітне випромінювання та забезпечують далекодію, зазвичай порівнюється з конденсацією Бозе-Ейнштейна та явищами, що включають макроскопічну квантову когерентність. У той же час Давидов відкрив пов'язаний принцип форм поздовжньої хвилі, що називається солітонами. Солітони з дискретними хвильовими частотами можуть викликати прямі зміни у конформації ДНК / РНК та/або генетичних змін, на додаток до індукування згортання білків та порушення внутрішньо- і міжклітинних хвильових зв'язків, що є необхідним для здоров'я клітин.

Актуальним є питання 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.

Важливого 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.

В моїй попередній роботі [21] було досліджено динаміку давидовського солітона в зовнішньому осцилюючому магнітному полі. Було розглянуто два випадки орієнтації магнітного поля: поздовжня та поперечна до напрямку молекулярного ланцюжка. Результати отримані без лінеаризації складних систем нелінійних рівнянь, що дозволило врахувати основні солітонні характеристики квазічастинок.

Показано, що в періодичному магнітному полі, направленому вздовж 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 [24].

Показано, що в поперечному періодичному магнітному 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 [25].

Врахування дисипації енергії солітонів приводить до спадання (сповільнення) прискорення солітона завдяки магнітному полю зі встановленням балансу швидкості.

Проте в попередніх розрахунках не враховувалась реакція ґратки ланцюжка на зміну електронної складової солітона. Це обґрунтовувалось тим, що параметри солітона є слабкозалежними від часу і рівняння для них можуть бути отримані з методу теорії збурень для нелінійних рівнянь.

Таким чином, зміна деформації ланцюжка за рахунок електронної складової солітона не розглядалася. Та враховуючи отримані результати, а саме те, що під дією зовнішнього періодичного поля параметри солітона стають залежними від часу, частоти та амплітуди поля, питання реакції ґратки

молекулярного ланцюжка є актуальним і розглядається в даній роботі. Солітон набуває прискорення, залежного від частоти зовнішнього поля, що не може не відобразитися на динаміці руху молекул ланцюжка. Необхідно зазначити, що під деформацією ланцюжка мається на увазі зміна міжмолекулярної відстані.

Викладемо коротку інформацію про структуру та зміст даної дипломної роботи.

Робота складається з чотирьох розділів.

В першому розділі розглядається давидовський солітон, його властивості, умови формування. Описується модель поставленої задачі, вільний молекулярний солітон та його рівняння руху.

В підрозділі 1.1 викладено основну інформацію про давидовський солітон, описано нелінійні рівняння, які дають в результаті солітонний розв'язок та отримано власне такі розв'язки. Розглянуто умови виникнення та поширення давидовського солітона.

В підрозділі 1.2 розглянуто вільний молекулярний солітон, складено рівняння руху. Описано молекулярний ланцюжок та подано загальний вигляд розв'язків рівнянь руху.

В другому розділі розглядається динаміка солітона у поздовжньому та поперечному відносно молекулярного ланцюжка зовнішньому періодичному магнітному полі. Описано рівняння руху для випадку поперечного магнітного поля та пояснюється, чому саме таке поле є предметом дослідження в даній роботі.

В підрозділі 2.1 розглянуто однокомпонентний солітон та проаналізовано отримані раніше рівняння руху і їх розв'язки.

В підрозділі 2.2 описується рух солітона Отримано рівняння руху для подальших досліджень.

В третьому розділі розглядається двокомпонентний солітон у поперечному магнітному полі. Враховується реакція ґратки молекулярного ланцюжка на зміну електронної складової солітона, яка, в свою чергу, змінюється під дією магнітного поля.

В підрозділі 3.1 враховується зміна електронної складової солітона, яка проводить до перенормування деформації ланцюжка – реакції ґратки на зміну хвильової функції солітона. Складено відповідні рівняння руху та пропонується вигляд розв'язку.

В підрозділі 3.2 викладено основні положення адіабатичного наближення (теорії збурень для солітонів). Отримано рівняння для слабкозалежних від часу параметрів нелінійного рівняння Шредінґера з малою, в порівнянні з основними, правою частиною.

В підрозділі 3.3 отримано та розв'язано рівняння для параметрів солітона, за рахунок зміни деформації молекулярного ланцюжка.

В підрозділі 3.4 розглядається зміна динамічної маси солітона, показано її залежність від частоти магнітного поля та його інтенсивності.

В підрозділі 3.5 показано різний характер зміни деформації ланцюжка в залежності від положення самого солітона.

В четвертому розділі розглядається динаміка солітона в поперечному магнітному полі з врахуванням дисипації енергії за рахунок випромінювання солітоном хвиль.

В підрозділі 4.1 описано коливання молекул ланцюжка внаслідок солітонного збудження. Схематично показано зміну реакції ґратки ланцюжка.

В підрозділі 4.2 описано вигляд рівнянь руху з врахуванням дисипації енергії, введено оператор дисипації енергії та отримано вираз для нього.

В підрозділі 4.3 отримано, нелінійне рівняння Шредінгера з дисипацією енергії. За допомогою теорії збурень отримано розв'язок для хвильової функції солітона в періодичному магнітному полі з поперечною орієнтацією.

Наведено висновки про складну динаміку солітона в періодичному магнітному полі поперечної до ланцюжка орієнтації.

РОЗДІЛ 1

Давидовський солітон

Низькорозмірні системи займають особливе місце в фізиці твердого тіла та біофізиці. До них відносяться органічні та неорганічні молекулярні сполуки, полімери (напівпровідникові та електропровідні), макромолекули (білкові молекули, ДНК та інші). За рахунок важливої ролі електрон-фононної взаємодії в них та зумовлених цим особливих фізичних властивостях. Так, макромолекули (такі як ДНК та альфа-спіральні білкові молекули), відіграють особливу роль в процесі переносу енергії та зарядів на макроскопічні відстані в біологічних процесах [24]. В моделі Давидова коливання групи атомів, що входять до складу пептидних груп всіх білкових молекул (так звані коливання амід I) породжує спотворення пов'язаних з ним водневих зв'язків, які, у свою чергу, локалізують збудження амиду I. Перенесення енергії коливань пептидних груп може здійснюватися солітонними збудженнями, що деформують молекулу. Завдяки тому, що електрон-фононна взаємодія є істотною в таких макромолекулах, має місце автолокалізація квазічастинки (електрона) в солітонному стані. Утворюється зв'язаний стан квазічастинки та створеної нею деформації ланцюжка (поляронний ефект). Такі молекулярні солітони називаються ще давидовськими солітонами.

Солітони являють собою нелінійні локалізовані хвилі, що зберігають свої основні властивості (амплітуда та швидкість) при взаємодії з собою подібними. Такі солітони описуються повністю інтегровними нелінійними рівняннями. В реальних фізичних системах часто встановлюються умови, що наближають ці системи до класу повністю інтегровних. Тому у фізиці під солітонами часто мають на увазі нелінійні хвилі, що близькі до солітонів, як точних розв'язків нелінійних рівнянь.

1.1. Давидовський солітон

Розглянемо молекулярний ланцюжок з надлишковим електроном та врахуємо електрон-фононну взаємодію в ньому. Виберемо напрямленість ланцюжка вздовж осі x і вважатимемо, що у вузлах ланцюжка na (тут a – стала ґратки, n – ціле число) розташовані молекули масою M . Як було показано в [15, 25], такий ланцюжок описується гамільтоніаном Фрьоліха

$$H = H_e + H_{ph} + H_{el-ph} , \quad (1.1)$$

де H_e – гамільтоніан електрона, H_{ph} – гамільтоніан фононної підсистеми (тобто гамільтоніан ланцюжка, що описується в термінах елементарних збуджень, тобто фононів), H_{el-ph} – гамільтоніан електрон-фононної взаємодії. У наближенні взаємодії найближчих сусідів ці складові мають вигляд:

$$H_e = \sum_n B_n^+ \left[E_0 B_n - J(B_{n+1} + B_{n-1}) \right] , \quad (1.2)$$

$$H_{ph} = \frac{1}{2} \sum_n \left[M^{-1} p_n^2 + \kappa (u_n - u_{n-1})^2 \right] , \quad (1.3)$$

$$H_{el-ph} = \frac{1}{2} \chi \sum_n B_n^+ B_n (u_{n+1} - u_{n-1}) . \quad (1.4)$$

Тут n – номер вузла розташування молекули масою M ; $B_n^+(B_n)$ – оператори народження (знищення) збудження пептидної групи з номером n ; u_n – оператор позовжнього зміщення з рівноважного положення na ; \hat{p}_n – оператор, спряжений до u_n ; κ – пружність ланцюжка; χ – параметр зв'язку міжмолекулярних збуджень. Коливання амід I мають енергію E_0 і деякий дипольний момент, що забезпечує резонансну взаємодію між сусідніми молекулами. $J = 2d^2a^{-3}$ – енергія резонансної взаємодії.

За допомогою унітарного оператора зміщень з рівноважних положень молекул, можна ввести когерентні стани зміщень $\beta_n(t)$ і спряжених до них імпульсів $\pi_n(t)$ в стані $\psi(t)$:

$$\beta_n(t) = \langle \psi(t) | u_n | \psi(t) \rangle, \quad (1.5)$$

$$\pi_n(t) = \langle \psi(t) | \hat{p}_n | \psi(t) \rangle. \quad (1.6)$$

В когерентних станах (1.5) (1.6) добуток дисперсій зміщення та імпульсу має мінімальне з можливих значень.

Переходячи в (1.1) до змінних $\beta_n(t)$ і $\pi_n(t)$ та з умовою нормування

$$\sum_n |\varphi_n(t)|^2 = 1 \quad (1.7)$$

отримуємо гамільтоніан ланцюжка:

$$\langle \psi(t) | H | \psi(t) \rangle = \sum_n \varphi_n^* \left\{ \left[E_0 + W + \frac{1}{2} \chi (\beta_n - \beta_{n-1}) \right] \varphi_n - J (\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1}) \right\}, \quad (1.8)$$

в якому W – енергія деформації ланцюжка:

$$W \equiv \frac{1}{2} \sum_n \left[\pi_n^2 M^{-1} + \kappa (\beta_n - \beta_{n-1})^2 \right]. \quad (1.9)$$

Інваріантність функції Гамільтона (1.8) відносно фазового перетворення $\varphi_n \rightarrow \varphi_n \exp(i\gamma)$, зміщення часу $t \rightarrow t + \tau$ і трансляційна інваріантність $n \rightarrow n + m$ призводить відповідно до законів збереження числа збуджень, енергії та імпульсу.

Тоді виразу (1.8) відповідає система рівнянь (1.10)-(1.11):

$$i\hbar \frac{d\varphi_n}{dt} = \left[E_0 + W - \frac{1}{2} \chi (\beta_{n+1} - \beta_{n-1}) \right] \varphi_n - J (\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1}), \quad (1.10)$$

$$M \frac{d^2 \beta_n}{dt^2} + \kappa [2\beta_n - \beta_{n+1} - \beta_{n-1}] = \frac{1}{2} \chi \left\{ |\varphi_{n+1}|^2 - |\varphi_{n-1}|^2 \right\}, \quad (1.11)$$

$$\pi_n = M \frac{d\beta_n}{dt}. \quad (1.12)$$

Рівняння (1.10)-(1.11) визначають два поля: поле $\varphi_n(t)$, яке характеризує розподіл густини ймовірності квазічастинки (внутрішньо пептидних коливальних збуджень або надлишкового електрона) вздовж ланцюжка і поле $\beta_n(t)$, яке характеризує зміщення молекули n в нове рівноважне положення. Тому такі енергетичні збудження можна назвати двокомпонентними збудженнями.

Якщо функції $\varphi_n(t)$ і $\beta_n(t)$ мало змінюються протягом однієї ланки ланцюжка, то в рівняннях (1.10)-(1.11) можна перейти до континуального наближення:

$$\varphi_n(t) \Rightarrow \Phi(x, t) \exp[i(kx - Et/\hbar)], \quad \beta_n(t) \Rightarrow \beta(x, t). \quad (1.13)$$

В такому випадку

$$\varphi_{n\pm 1}(t) \Rightarrow e^{i[k(x\pm a) - Et/\hbar]} \left\{ 1 \pm a \frac{\partial}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots \right\} \Phi(x, t), \quad (1.14)$$

$$\beta_{n\pm 1}(t) = \left\{ 1 \pm a \frac{\partial}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots \right\} \beta(x, t) . \quad (1.15)$$

Тут $\Phi(x, t)$ і $\beta(x, t)$ – дійсні функції.

За допомогою рівнянь (1.13)-(1.15) повна енергія зміщень матиме вигляд:

$$W \equiv \frac{1}{2a} \int \left[M \left(\frac{\partial \beta}{\partial t} \right)^2 + \kappa \rho^2 \right] dx , \quad (1.16)$$

де ρ – функція, яка характеризує зменшення ($a \rightarrow a - \rho$) відстані a між сусідніми молекулами,

$$\rho = -a \frac{\partial \beta}{\partial x} . \quad (1.17)$$

В такому випадку система рівнянь (1.10)-(1.11) перетвориться в рівняння в часткових похідних:

$$\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} + 2aJ \sin ka \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0 , \quad (1.18)$$

$$\left[\Lambda + a^2 J \cos ka \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \chi \rho(x, t) \right] \Phi(x, t) = 0 , \quad (1.19)$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} - V_0^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \rho(x, t) + \frac{\chi}{\kappa} V_0^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = 0 . \quad (1.20)$$

Тут $V_0 = a\sqrt{\kappa / M}$ – швидкість звуку в ланцюжку. Енергія збудження E пов'язана зі спектральним параметром Λ співвідношенням:

$$\Lambda = E - E_0 - W + 2J \cos ka . \quad (1.21)$$

Умова нормування (1.7) перепишеться в такому вигляді:

$$\frac{1}{a} \int \Phi^2(x, t) dx = 1 . \quad (1.22)$$

При фіксованому значенні $|k| \leq \pi/2$ рівняння (1.18)-(1.20) визначають енергію, функції $\Phi(x,t)$ і $\rho(x,t)$ станів ланцюжка, які відповідають одному внутрішньо молекулярному збудженню з енергією E_0 .

У випадку збуджень, які розповсюджуються з постійною швидкістю V , можна перейти в рухому систему координат [26]

$$\xi = x - x_0 - Vt \quad (1.23)$$

де x_0 – деяка початкова координата. Положимо $\Phi(x,t) = \Phi(\xi)$, $\rho(x,t) = \rho(\xi)$.

Тоді

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -V \frac{d\Phi}{d\xi}, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = -V \frac{d\rho}{d\xi} \quad (1.24)$$

і система рівнянь (1.18)-(1.20) перетвориться в систему звичайних диференціальних рівнянь:

$$[\hbar V - 2aJ \sin ka] \frac{d\Phi}{d\xi} = 0 \quad (1.25)$$

$$\left[\Lambda + a^2 J \cos ka \frac{d^2}{d\xi^2} + \chi \rho(\xi) \right] \Phi(\xi) = 0 \quad (1.26)$$

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \left[(1 - s^2) \rho(\xi) - \frac{\chi}{\kappa} \Phi^2(\xi) \right] = 0 \quad (1.27)$$

Так як $\rho(\xi) = -a \frac{d\beta(\xi)}{d\xi}$, то

$$\frac{\partial \beta}{\partial t} = -V \frac{d\beta}{d\xi} = V \frac{\rho}{a} \quad (1.28)$$

Відповідно, повна енергія деформації ланцюжка (1.16) матиме вигляд:

$$W = \frac{MV_0^2}{2a^3} (1 + s^2) \int \rho^2(\xi) d\xi \quad (1.29)$$

З рівнянь (1.25) і (1.27) та за допомогою умови нормування знаходимо:

$$\sin ka = \frac{\hbar V}{2Ja} \quad (1.30)$$

$$\rho(\xi) = \frac{\chi \Phi^2}{\kappa(1-s^2)} \quad (1.31)$$

З виразу (1.30) випливає умова на допустиму швидкість переміщення збудження:

$$V \leq V_g = 2aJ / \hbar \quad (1.32)$$

Тут V_g – максимальна швидкість резонансного переносу збудження між молекулами.

Відповідно до нерівності (1.32), розвинута нижче теорія справедлива тільки для таких швидкостей переміщення збудження, які менші ніж максимальна швидкість резонансного переносу збудження між молекулами при їхньому жорсткому закріпленні в ланцюжку. В такому випадку користуємося адіабатичним наближенням.

Тоді відповідно до (1.30) хвильове число k лінійно залежить від швидкості переміщення колективного збудження

$$ak = \hbar V / 2aJ = V / V_g \quad (1.33)$$

Таким чином, при довгохвильовому наближенні $ka \ll 1$ виконується також і вказане вище адіабатичне наближення (1.32).

Підставивши значення $\rho(\xi)$ в рівняння (1.26), можна перетворити його в нелінійне рівняння Шредінгера для стаціонарних колективних збуджень, які переміщуються з постійною швидкістю V та енергією E , яка визначається з (1.21)

$$\left[\Lambda + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\xi^2} + G\Phi^2(\xi) \right] \Phi(\xi) = 0 \quad (1.34)$$

тут

$$\hbar^2 / 2m \equiv a^2 J, \quad G \equiv \chi^2 / \kappa (1 - s^2) \quad (1.35)$$

З (1.35) отримуємо рівняння для визначення спектрального параметру Λ :

$$\Lambda = \frac{1}{a} \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\Phi}{d\xi} \right)^2 - G\Phi^4(\xi) \right] dx \quad (1.36)$$

Тоді у довгохвильовому наближенні повна енергія збудження визначається

$$E = E_0 + W - \frac{\hbar^2}{a^2 m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \Lambda \quad (1.37)$$

Ця енергія характеризує зв'язаний стан двох збуджень – внутрішні коливання і локальну деформацію ланцюжка.

Розглянемо нелінійне рівняння Шредінгера (1.34) для огибаючої хвильової функції (1.13). На відмінно від лінійних рівнянь, які мають єдиний розв'язок при заданих граничних умовах, дане нелінійне рівняння допускає множину розв'язків за деяких умов. Це означає появу деякого автономного розв'язку по відношенню до граничних умов.

Одним з розв'язків рівняння (1.34) є розв'язок у вигляді плоских хвиль. При швидкостях більших за швидкість звуку в ланцюжку, цей розв'язок єдиний. Якщо швидкість колективного збудження перевищує швидкість поздовжнього звуку $s^2 > 1$, то деформація ланцюжка не встигає за збудженням. В такому випадку параметр нелінійності від'ємний і рівняння Шредінгера (1.34) не має стаціонарних розв'язків.

При значеннях $s^2 < 1$ параметр нелінійності в рівнянні (1.34) додатній. В цьому випадку воно має нормований частковий розв'язок у вигляді:

$$\Phi(\xi) = \sqrt{aQ/2} \operatorname{sech}(Q\xi) \quad (1.38)$$

при значеннях

$$Q = \frac{maG}{2\hbar^2} = \frac{ma\chi^2}{2\kappa\hbar^2(1-s^2)}, \quad (1.39)$$

$$\Lambda = -\hbar^2 Q^2 / 2m. \quad (1.40)$$

З врахуванням (1.28) зменшення відстані між молекулами визначається:

$$\rho(\xi) = \frac{a\chi Q}{2\kappa(1-s^2)\hbar^2(Q\xi)} \quad (1.41)$$

При цьому зміщення молекул з рівноважних положень визначаються функцією:

$$\beta(\xi) = \frac{\chi}{\kappa(1-s^2)} [1 - \operatorname{th}(Q\xi)] \quad (1.42)$$

Збудження, яке описується виразом (1.38) називається солітоном. Такі збудження являються двокомпонентними: вони переміщують вздовж ланцюжка внутрішньопептидні коливання та локальну деформацію.

Солітони характеризують стійкий розв'язок нелінійного рівняння Шредінгера і зосереджені тільки в невеликій області ланцюжка. Солітон описується стаціонарною хвилею, профіль якої $\Phi(\xi)$ в процесі розповсюдження не змінюється.

Так як рух солітона супроводжується деформацією ланцюжка, то він має велику масу і, як наслідок, може переносити значну кінетичну енергію навіть при малих швидкостях руху.

Враховуючи те, що в гармонічному наближенні солітон завжди рухається зі швидкістю, меншою за швидкість звуку в ланцюжку, то він не випромінює фонони. Тобто його кінетична енергія не перетворюється в енергію теплового руху. Ця особливість забезпечує високу стабільність солітонів.

Енергія, необхідна для руйнування солітона, тобто розщеплення його на плоску хвилю та однорідну деформацію, є дуже великою і визначається:

$$\Delta E = \frac{ma^2\chi^4}{24\kappa^2\hbar^2} \quad (1.43)$$

Вигляд солітонного розв'язку ілюструє Рис.1.1.

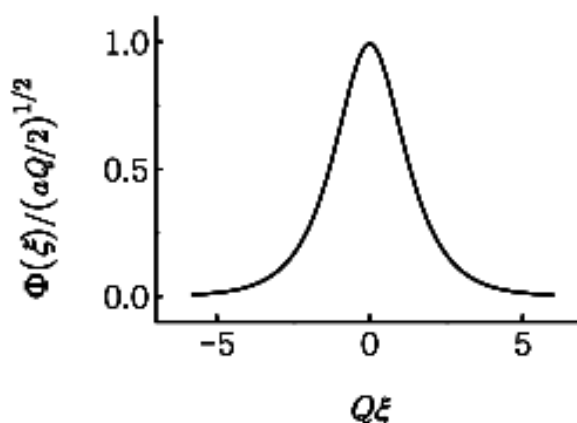


Рис.1.1 Форма солітонного розв'язку нелінійного рівняння Шредінгера

Форма солітонного розв'язку не залежить від методу їх утворення. Вона являється самоузгодженою внаслідок компенсації дисперсії середовища, яка розмиває збудження, та нелінійності, яка локалізує його.

1.2. Рівняння руху та загальні властивості давидовського солітона

Динамічні властивості солітонів залежать від зовнішніх полів. В даному розділі розглянуто вільний молекулярний солітон та складено рівняння руху для нього з врахуванням зовнішнього поля.

Розглядаємо модель нескінченного молекулярного ланцюжка при нульовій температурі. Припускаємо, що молекули знаходяться на деякій відстані a одна від одної та мають масу M . При цьому під деформацією ρ

ланцюжка ми розуміємо зміну міжмолекулярної відстані за рахунок коливального руху. Коливальний рух молекул характеризується сталими J – енергія резонансної взаємодії коливань та κ – коефіцієнт пружності спіралі. Вважаємо ланцюжок напрямленим вздовж осі x (Рис.1.2).

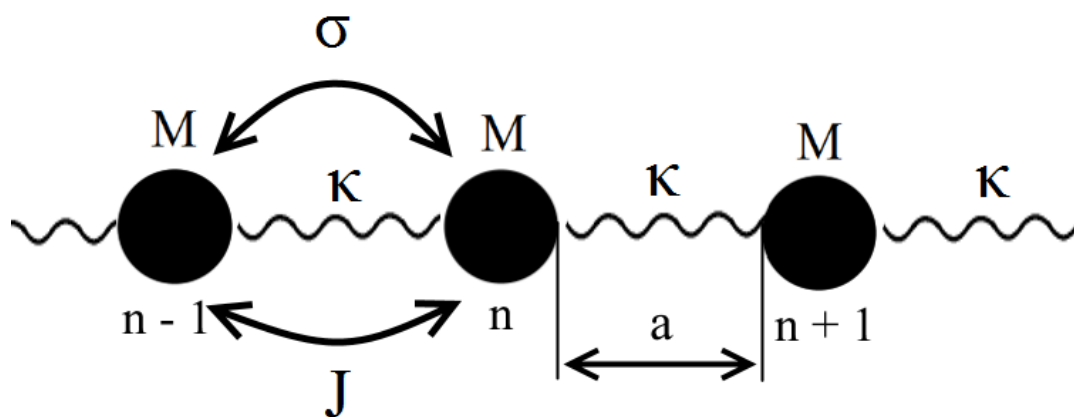


Рис.1.2 Модель молекулярного ланцюжка

Такий молекулярний ланцюжок з надлишковим електроном та з врахуванням електрон-фононної взаємодії описується гамільтоніаном Фрьоліха (1.1):

$$H = H_e + H_{ph} + H_{el-ph} \quad (1.44)$$

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:

$$H_e = \sum \left[\frac{p^2}{2m_x} - \sigma \rho(x, t) \right] \quad (1.45)$$

Це приводить до наступних рівнянь руху для електронної та фононної підсистем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H \psi(\vec{r}, t) \quad (1.46)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - V_0^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \rho(x, t) + \frac{\sigma a^2}{M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} |\psi(x, t)|^2 = 0 \quad (1.47)$$

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 Шредінгера [28]:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\sigma \rho(x, t)}{2Jg} \right) \psi(x, t) = 0 \quad (1.48)$$

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

фононної взаємодії:

$$g = \frac{\sigma^2}{2J\omega(1-s^2)}, \quad \omega = \frac{MV_0^2}{a^2} \quad (1.49)$$

Тут $s = |V|/V_0$ – відносна швидкість солітона та ω – стала пружності ланцюжка, яка і визначає швидкість звуку у ньому.

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

$$\psi(x, t) = \sqrt{g} \operatorname{sech}[g(x - Vt)/a] \exp[i(k_x x - \omega t)] \quad (1.50)$$

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

Висновки до розділу 1

Таким чином, наявність електрон-фононної взаємодії в молекулярних ланцюжках приводить до поляронних ефектів. Зокрема, при помірній електрон-фононній взаємодії електрон локалізується у солітонному стані, на зразок полярону великого радіусу. На відміну від загальноприйнятого визначення полярона великого радіусу, в солітонному розв'язку електрон-фононну взаємодію враховано точно, а не за теорією збурень. Вільний солітон за відсутності зовнішніх полів розповсюджується з постійною швидкістю, меншою за швидкість звуку і таким чином не випромінює звукових коливань.

РОЗДІЛ 2

Давидовський солітон у магнітному полі

Розглядаємо динаміку давидовського солітона у магнітному полі. Аналізуючи отримані в попередній роботі результати для різних напрямків магнітного поля, обираємо одну, найбільш складну, для подальших досліджень. В цьому випадку нелінійна система двох рівнянь може бути зведена у найнижчому порядку до нелінійного рівняння Шредінгера з правою частиною – збуренням, що визначається магнітним полем.

В цьому розділі буде проаналізована динаміка солітона в поздовжньому та поперечному до ланцюжка напрямках зовнішнього осцилюючого магнітного поля. Будуть складені рівняння руху для випадку поперечного магнітного поля та зведення цих рівнянь до безрозмірного нелінійного рівняння Шредінгера зі збуренням.

2.1. Однокомпонентний солітон у магнітному полі

Розглянемо вплив періодичного магнітного поля на солітон. В попередніх дослідженнях [21] було розглянуто два протилежних напрямки магнітного поля: вздовж ланцюжка та перпендикулярно до нього. Проаналізуємо отримані результати.

Поздовжнє магнітне поле задавалось виразом:

$$\vec{B}(t) = (B_0 \cos \omega t, 0, 0) \quad (2.1)$$

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 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.

Повний розв'язок для хвильової функції задавався виразом:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_s(x, t)\psi_{\perp}(y, z, t) \quad (2.2)$$

Де $\psi_s(x, t)$ – солітонна хвильова функція, яка визначається з (1.50), а поперечна компонента співпадає з розв'язком для гармонічного квантового осцилятора:

$$\psi_{\perp}(y, z, t) = \frac{1}{\sqrt{l}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{m\omega_0}{\hbar} z'^2\right) H_n(z') \exp\left(ik_y y - iE_{\perp} t \frac{1}{\hbar}\right) \quad (2.3)$$

Осцилююче магнітне поле, направлене перпендикулярно до ланцюжків, має істотніший вплив на динаміку давидовських солітонів. Параметри молекулярного солітона, зокрема його швидкість, ширина та енергія, стають залежними від часу. 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.

Зважаючи на таку динаміку зміни параметрів солітона, для наступних розрахунків доцільно обрати саме поперечний напрямок зовнішнього магнітного поля.

2.2. Солітон у поперечному магнітному полі

Автолокалізація квазічастинки 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:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H\psi(\vec{r}, t) \quad (2.4)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - V_0^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \rho(x, t) + \frac{\sigma a^2}{M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} |\psi(x, t)|^2 = 0 \quad (2.5)$$

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.

Розглядаючи задачу в тривимірному просторі, вважаємо молекулярний ланцюг направленим по осі x . Повна хвильова функція електрона в такому випадку:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_s(x, t) \psi_\perp(y, z, t) \quad (2.6)$$

Гамільтоніан електрона матиме вигляд:

$$H = \sum_{\nu=1}^3 \left[\left(p_{\nu} - \frac{e}{c} A_{\nu} \right)^2 \frac{1}{2m_{\nu}} - \sigma \rho(x, t) \right] \quad (2.7)$$

У загальному випадку магнітне поле має довільний напрямок. Ми завжди можемо розкласти магнітне поле на поздовжню (вздовж молекулярного ланцюжка) та поперечну компоненти.

Нехай поперечне магнітне поле задається виразом:

$$\vec{B}(t) = (0, B_0 \cos \omega t, 0) \quad (2.8)$$

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

$$\vec{A} = (0, 0, -B_0 x \cos \omega t) \quad (2.9)$$

Як відомо з квантової механіки, для врахування магнітного поля у відповідному гамільтоніані необхідно зробити заміну p . Враховуючи те, що $p_{\nu} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_{\nu}}$ та виходячи з (2.9) отримуємо для (2.7):

$$H_s = -\frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m_z} \left(\hbar k_z + \frac{e}{c} B_0 x \cos \omega t \right)^2 - \sigma \rho(x, t) \quad (2.10)$$

$$H_{\perp} = -\frac{\hbar^2}{2m_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad (2.11)$$

Розглянемо розв'язок (2.4) для солітонної хвильової функції, гамільтоніан якої має вигляд (2.10):

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \sigma \rho(x, t) \right] \psi_s(x, t) = \frac{1}{2m_z} \left(\hbar k_z + \frac{e}{c} B_0 x \cos \omega t \right)^2 \psi_s(x, t) \quad (2.12)$$

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

$$\tilde{x} = \sqrt{g} \frac{x}{a}, \quad \tilde{x}_0 = \frac{\sqrt{g} \hbar c k_z}{aeB_0} \quad (2.13)$$

$$\tau = 2 \frac{Jgt}{\hbar}, \quad \Omega = \frac{\omega \hbar}{2Jg} \quad (2.14)$$

В нових змінних рівняння (2.12) набуває вигляду:

$$\left[i \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\sigma \rho}{2Jg} \right] \psi_s(x, t) = \varepsilon (\tilde{x} \cos \Omega \tau + \tilde{x}_0)^2 \psi_s(x, t) \quad (2.15)$$

Тут J – стала обмінної взаємодії, g – безрозмірна стала електрон-фононної

зв'язки, κ – константа пружності ланцюжка.

Коефіцієнт ε визначається:

$$\varepsilon = \frac{e^2 B_0^2 a^2}{4m_z J c^2 g^2} \quad (2.16)$$

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

Висновки до розділу 2

Таким чином, динаміка солітона у зовнішньому змінному магнітному полі описується нелінійною системою двох рівнянь. З фізичних міркувань можна виділити два характерні напрямки орієнтації магнітного поля: паралельно ланцюжку (поздовжня орієнтація) та перпендикулярно цьому напрямку (поперечна орієнтація). Динаміка електрона в ланцюжку за наявності зовнішнього поля істотно відрізняється для цих двох орієнтацій магнітного поля.

Для поздовжнього напрямку магнітного поля повна хвильова функція надлишкового електрона описується добутком солітонної хвильової функції вздовж ланцюжка та хвильовими функціями осцилятора у напрямках, перпендикулярних до ланцюжка.

В магнітному полі з поперечною орієнтацією параметри молекулярного солітона, зокрема його швидкість, ширина та енергія, стають залежними від часу. 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.

Найбільш якісні зміни динаміки електрона мають місце в полях з поперечною орієнтацією.

В цьому випадку нелінійна система двох рівнянь може бути зведена у найнижчому порядку до нелінійного рівняння Шредінгера з правою частиною. При цьому коефіцієнт у правій частині можна розглядати як малий параметр: для магнітного поля величини $B_0 = 1 \text{ Тл}$ коефіцієнт $\varepsilon = 1,26 \cdot 10^{-24}$. Коефіцієнт у правій частині нелінійного рівняння Шредінгера залежить від частоти магнітного поля та його інтенсивності і є функцією, залежною від часу.

РОЗДІЛ 3

Двокомпонентний давидовський солітон у магнітному полі

В даному розділі розглянуто рух солітона в зовнішньому поперечному осцилюючому магнітному полі. Враховується реакція ґратки молекулярного ланцюжка на зміну електронної складової солітона, яка, в свою чергу, змінюється під дією магнітного поля. Параметри солітона, які залежать від магнітного поля, тепер залежать і від зміни деформації ланцюжка. Отримуємо рівняння руху для поправки до деформації ланцюжка. Магнітне поле є відносно малою поправкою до рівнянь руху солітона, що дозволяє нам нижче скористатися адіабатичною теорією збурень (з цією метою, нижче ми дамо загальну характеристику методу оберненої задачі розсіювання та теорії збурень). Отримуємо розв'язки для параметрів солітона.

Показано, що з врахуванням зміни електронної складової солітона, змінюється динамічна маса солітона. Вона набуває залежності від амплітуди та частоти зовнішнього магнітного поля.

Показано (аналітично і графічно), що реакція ґратки ланцюжка на зміну електронної складової солітона має різний характер в залежності від положення самого солітона.

3.1. Динамічні рівняння солітона у магнітному полі

Параметри солітона стають залежними від зовнішнього магнітного поля та його частоти. Щоб врахувати зміну електронної складової, перенормовуємо хвильову функцію солітона. Власне це перенормування і вносить поправку до деформації ланцюжка, тобто враховує реакцію ґратки на зміну електронної

складової солітона [29]. За своєю природою магнітне поле є відносно малою поправкою до рівнянь руху солітона, яку можна характеризувати безрозмірним

коефіцієнтом ε , що дозволяє нам нижче скористатися адіабатичною теорією

збурень.

Для солітонної хвильової функції вплив електро-магнітного поля задається:

$$\psi_s(x, t) = \psi_{s0}(x, t) + \varepsilon \psi_{s1}(x, t) \quad (3.1)$$

Відповідно деформація ґратки має поправку:

$$\rho(x, t) = \rho_0(x, t) + \varepsilon \rho_1(x, t) \quad (3.2)$$

Тут $\psi_{s0}(x, t)$ і $\rho_0(x, t)$ – солітонна хвильова функція та деформація ланцюжка, відповідно, в нульовому порядку теорії збурень. А вже зміна даних величин за рахунок електро-магнітного поля задається другим доданком у відповідних виразах.

Тоді $\psi_{s0}(x, t)$ і $\rho_0(x, t)$ в межах адіабатичної теорії збурень визначаються:

$$\psi_{s0}(x, t) = \frac{\sqrt{G}}{2\sqrt{1-s^2}} \frac{\exp\left(i\left[\mu(x - \xi(t))\right] + i\eta\right)}{\text{ch}\left[\nu(x - \xi(t))\right]} \quad (3.3)$$

$$\rho_0(x, t) = \frac{\sigma}{\kappa(1-s^2)} \left| \psi_s(x, t) \right|^2 \quad (3.4)$$

тут швидкість V визначається як

$$V = \frac{d\xi}{dt}, \quad s = \frac{V}{V_0} \quad (3.5)$$

Підставляючи $\rho(x, t)$ в рівняння (2.15) остаточно отримуємо нелінійне

рівняння Шредінгера з правою частиною в такому вигляді:

$$\begin{aligned} & \left[i \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{1}{2} |\psi_s(\tilde{x}, \tau)|^2 \right] \psi_s(\tilde{x}, \tau) = \\ & = \varepsilon \left[(\tilde{x} \cos \Omega \tau + \tilde{x}_0)^2 - \frac{\sigma}{2Jg} \rho_1(\tilde{x}, \tau) \right] \psi_s(\tilde{x}, \tau) \end{aligned} \quad (3.6)$$

Зручно представити рівняння (3.6) у вигляді:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{1}{2} |\psi|^2 \psi = i \varepsilon R[\psi] \quad (3.7)$$

де введено позначення

$$R[\psi] = -i \left[(\tilde{x} \cos \Omega \tau + \tilde{x}_0)^2 - \frac{\sigma}{2Jg} \rho_1(\tilde{x}, \tau) \right] \psi \quad (3.8)$$

За наявності правої частини в (3.7) 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. Важливо відмітити, що ми не користуємося методом лінеаризації нелінійних рівнянь і завдяки цьому зберігаємо солітонні властивості шуканого розв'язку.

У відповідності до цього шукаємо розв'язок (3.7) у вигляді

$$\psi_s(\tilde{x}, \tau) = 2\nu \operatorname{sech} \zeta \exp[i\varphi] \quad (3.9)$$

тут

$$\zeta = 2\nu(\tilde{x} - \tilde{\xi}), \quad \varphi = \frac{\mu\zeta}{\nu} + \eta \quad (3.10)$$

Для визначення поправки до деформації необхідно спочатку отримати рівняння руху з врахуванням зміни електронної складової солітона [30]. Ця поправка впливає на параметри солітона ν , $\tilde{\xi}$, μ , η , які, як зазначено у виразі (3.9), визначають солітонну хвильову функцію.

Розглядаючи систему рівнянь руху бачимо, що нам необхідно за допомогою (3.1) визначити рівняння (2.5) для ρ_1 .

Підставляємо (3.1) в (3.4) щоб отримати вираз для деформації (3.2):

$$\rho = \rho_0 - \frac{\sigma\varepsilon}{\kappa(1-s^2)}(\psi_s^{(0)}\psi^{*(1)} + \psi_s^{*(0)}\psi^{(1)}) + \varepsilon\rho_1 \quad (3.11)$$

Для хвильових функцій та їхніх похідних знаходимо таку рівність:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}|\psi_s|^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}|\psi_s|^2 \dot{\xi}^2 - \frac{\partial}{\partial x}|\psi_s|^2 \ddot{\xi} \quad (3.12)$$

Тоді за допомогою отриманих виразів та нехтуючи членами другого порядку малості по ε , отримуємо перенормоване рівняння (2.5):

$$\frac{\partial^2 \rho_1}{\partial t^2} - V_0^2 \frac{\partial^2 \rho_1}{\partial x^2} = -\frac{\sigma a}{\kappa} \ddot{\xi} \frac{\partial |\psi_s|^2}{\partial x} \quad (3.13)$$

Розв'язок рівняння (3.13) з початковою умовою $\rho_1(t \rightarrow -\infty) = 0$ має вигляд:

$$\rho_1 = -\frac{\sigma a}{2\pi\kappa V_0} \int_{-\infty}^t dt' \ddot{\xi}(t') \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{\sin[V_0 q(t-t')]}{q} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{iq(x-x')} \frac{\partial |\psi_s(x', t')|^2}{\partial x'} \quad (3.14)$$

3.2. Адіабатичне наближення (теорія збурень для солітонів)

Розглянемо нелінійне рівняння Шредінгера

$$i \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + G |\psi|^2 \psi = 0 \quad (3.15)$$

з умовою нормування:

$$\int |\psi(x, t)|^2 dx = 1 / \sqrt{J} \quad (3.16)$$

Рівняння (3.15) може бути представлено в операторному вигляді:

$$\frac{\partial L}{\partial t} = i[L, A] \quad (3.17)$$

Оператори L і A (пара Лакса) мають вигляд:

$$L = i \begin{pmatrix} 1+p & 0 \\ 0 & 1-p \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} + \begin{pmatrix} 0 & \psi^* \\ \psi & 0 \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

$$A = -p \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \begin{pmatrix} \frac{|\psi|^2}{1+p} & i\psi_x^* \\ -i\psi_x & -\frac{|\psi|^2}{1-p} \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

$$G = \frac{2}{1-p^2} \quad (3.20)$$

Розглянемо задачу на власні значення оператора L :

$$LV = \lambda V, \quad V = \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

Для спрощення введемо наступну заміну:

$$V_1 = \sqrt{1-p} \exp[-i\lambda x / (1-p^2)] v_2 \quad (3.22)$$

$$V_2 = \sqrt{1+p} \exp[-i\lambda x / (1-p^2)] v_1 \quad (3.23)$$

Використовуючи вирази (3.22) – (3.23) зводимо задачу (3.21) до системи лінійних диференціальних рівнянь першого порядку:

$$v_1' + i\zeta v_1 = qv_2 \quad (3.24)$$

$$v_2' - i\zeta v_2 = -q^* v_1 \quad (3.25)$$

в яких t – параметр, а q і ζ визначаються:

$$q(x, t) = i\sqrt{\frac{G}{2}}\psi(x, t), \quad \zeta = \frac{\lambda G}{2}\sqrt{1 - \frac{2}{G}} \quad (3.26)$$

При дійсному значенні $\zeta = \xi$ визначимо функції Іоста φ , ϕ як розв'язки рівнянь (3.24) – (3.25) з асимптотиками [18]:

$$\varphi \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\xi x} \quad (3.27)$$

$$\phi \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\xi x} \quad (3.28)$$

Пара розв'язків ϕ та $\bar{\phi} = \begin{pmatrix} +\phi_2^* \\ -\phi_1^* \end{pmatrix}$ утворює повну систему, тому справедливий розклад:

$$\varphi = a(\xi)\bar{\phi} + b(\xi)\phi \quad (3.29)$$

Коефіцієнти якого задовольняють співвідношення:

$$|a(\xi)|^2 + |b(\xi)|^2 = 1 \quad (3.30)$$

Функції Іоста φ , $\bar{\phi}$ допускають аналітичне продовження в верхню напівплощину комплексної площини $\zeta = \xi + i\eta$ ($\eta > 0$), відповідно, і $a(\xi)$ також допускає аналітичне продовження. Точки верхньої напівплощини $\zeta = \zeta_j$,

в яких $a(\xi)$ перетворюється в нуль, відповідають власним значенням задачі (3.24) – (3.25).

Власні значення оператора L не залежать від часу, що дозволяє встановити залежність від часу дійсної і уявної частини полюсів операторів проходження та відбивання оберненої задачі розсіювання. Ці параметри і визначають параметри солітонного розв'язку: швидкість, амплітуду та ширину солітона [31]. Ця ж обставина дозволяє вивести загальні рівняння для вищезазначених параметрів солітона у випадку збуреного нелінійного рівняння Шредінгера, тобто нелінійного рівняння Шредінгера з малою частиною, що входить з малим коефіцієнтом.

Розглянемо деякий солітонний розв'язок нелінійного рівняння Шредінгера:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + G |\psi|^2 \psi = i \varepsilon R[\psi] \quad (3.31)$$

який має вигляд:

$$\psi_s(x, t) = -2\kappa^2 \operatorname{sech}^2 z \quad (3.32)$$

$$z = \kappa(t) [x - \xi(t)] \quad (3.33)$$

$$\lambda = k^2 \quad (3.34)$$

Розв'яжемо рівняння (3.21) для L , що визначається з (3.18), використовуючи вираз для хвильової функції солітона (3.32). Отримуємо функції Іоста у вигляді:

$$\phi(x, k) = e^{ikx} \left\{ k + i\kappa \operatorname{th} [\kappa(x - \xi)] \right\} (k + i\kappa)^{-1} \quad (3.35)$$

$$\varphi(x, k) = e^{-ikx} \left\{ k - i\kappa \operatorname{th} [\kappa(x - \xi)] \right\} (k + i\kappa)^{-1} \quad (3.36)$$

Звідси знаходимо:

$$a(k) = (k - i\kappa)(k + i\kappa)^{-1}, \quad b(k) = 0 \quad (3.37)$$

Дискретний спектр [32] тут складається з одного власного значення $\lambda = -\kappa^2$ та задовольняє рівняння $a(k) = 0$. Тоді функції Іоста:

$$\phi(x, i\kappa) = \rho \phi(x, i\kappa) \quad (3.38)$$

$$\rho = \exp(2\kappa\xi), \quad \phi(x, i\kappa) = \frac{1}{2} \exp(-\kappa\xi) \operatorname{sech} z \quad (3.39)$$

Звідси отримуємо:

$$\frac{d\kappa}{dt} = -\frac{\varepsilon}{4\kappa} \int_{-\infty}^{\infty} R[\psi_s(z)] \operatorname{sech}^2 z dz \quad (3.40)$$

$$\frac{d\xi}{dt} = 4\kappa^2 - \frac{\varepsilon}{4\kappa^3} \int_{-\infty}^{\infty} R[\psi_s(z)] \left(z + \frac{1}{2} \operatorname{sh} 2z \right) \operatorname{sech}^2 z dz \quad (3.41)$$

При $\varepsilon = 0$ добре відомі результати нульового наближення. Відзначимо також, що якщо $R[\psi_s]$ є непарною функцією z , збурення в першому наближенні не впливають на амплітуду солітона, але впливають на його швидкість; якщо $R[\psi_s]$ є парною функцією z , то амплітуда змінюється, а швидкість залежить від амплітуди таким самим чином, як і при нульовому наближенні $\varepsilon = 0$.

Розв'язок для хвильової функції шукаємо у вигляді:

$$\psi_s(x, t) = 2\nu \operatorname{sech} z \exp\left(\frac{i\mu x}{\nu} + i\eta\right) \quad (3.42)$$

в якому

$$z = 2\nu(x - \xi) \quad (3.43)$$

Шукаємо параметри ν , μ , ξ , η . Для цього підставимо рівняння (3.42), (3.18) і (3.19) у вираз (3.21). Отримуємо функції Іоста:

$$\phi(x, \lambda) = \frac{\exp\left(\frac{i\lambda z}{2\nu} + i\lambda\xi\right)}{\lambda - \mu + i\nu \operatorname{th} z} \begin{pmatrix} \nu \operatorname{sech} z \exp\left(-\frac{i\mu z}{\nu} - i\delta\right) \\ \lambda - \mu + i\nu \operatorname{th} z \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

$$\varphi(x, \lambda) = a(\lambda) \bar{f}(x, \lambda) \quad (3.45)$$

В ЯКИХ

$$a(\lambda) = \frac{\lambda - \mu - i\nu}{\lambda - \mu + i\nu}, \quad b(\lambda) = 0 \quad (3.46)$$

Дискретний спектр складається тут з одного свого значення:

$$\lambda = \zeta = \mu + i\nu \quad (3.47)$$

Легко перевірити, що функції $\varphi(x, \lambda)$ та $f(x, \lambda)$ при $\lambda = \zeta$ стають пропорційними одне одному $\varphi(x, \zeta) = \rho f(x, \zeta)$, а ρ :

$$\rho = i \exp(i\delta - 2i\zeta\xi) \quad (3.48)$$

Остаточно отримуємо для параметрів ν , μ , $\tilde{\xi}$, η :

$$\frac{d\nu}{d\tau} = \frac{\varepsilon}{2} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech} \zeta R[\psi] \exp(-i\varphi) d\zeta \quad (3.49)$$

$$\frac{d\mu}{d\tau} = \frac{\varepsilon}{2} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sh} \zeta}{\operatorname{ch}^2 \zeta} R[\psi] \exp(-i\varphi) d\zeta \quad (3.50)$$

$$\frac{d\tilde{\xi}}{d\tau} = -\frac{1}{2\nu} \operatorname{Im}(-2(\mu + i\nu)^2) + \frac{\varepsilon}{4\nu^2} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\zeta}{\operatorname{ch} \zeta} R[\psi] \exp(-i\varphi) d\zeta \quad (3.51)$$

$$\frac{d\eta}{d\tau} = 2\mu \frac{d\tilde{\xi}}{d\tau} + \operatorname{Re}(-2(\mu + i\nu)^2) + \frac{\varepsilon}{2\nu} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - \zeta \operatorname{th} \zeta}{\operatorname{ch} \zeta} R[\psi] \exp(-i\varphi) d\zeta \quad (3.52)$$

В адіабатичному наближенні ми знехтували зміною форми солітону і зростанням «хвоста» в результаті збурення. Ці ефекти визначаються відхилення

коефіцієнтів $a(\lambda, t)$, $b(\lambda, t)$ від їх значень (3.37) або (3.46). Оскільки ці відхилення ростуть, хвиля все більш відрізняється від солітону так, що адіабатичне наближення зі зростанням часу втрачає сенс.

3.3. Залежність параметрів солітона від часу

Визначимо залежність параметрів солітона від деформації ланцюжка. В загальному вигляді, за допомогою теорії збурень вони визначаються наступним чином:

$$\frac{d\nu}{d\tau} = \frac{\varepsilon}{2} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech} \zeta R[\psi] \exp(-i\varphi) d\zeta \quad (3.53)$$

$$\frac{d\mu}{d\tau} = \frac{\varepsilon}{2} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sh} \zeta}{\operatorname{ch}^2 \zeta} R[\psi] \exp(-i\varphi) d\zeta \quad (3.54)$$

$$\frac{d\tilde{\xi}}{d\tau} = -\frac{1}{2\nu} \operatorname{Im} \left(-2(\mu + i\nu)^2 \right) + \frac{\varepsilon}{4\nu^2} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\zeta}{\operatorname{ch} \zeta} R[\psi] \exp(-i\varphi) d\zeta \quad (3.55)$$

$$\frac{d\eta}{d\tau} = 2\mu \frac{d\tilde{\xi}}{d\tau} + \operatorname{Re} \left(-2(\mu + i\nu)^2 \right) + \frac{\varepsilon}{2\nu} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - \zeta \operatorname{th} \zeta}{\operatorname{ch} \zeta} R[\psi] \exp(-i\varphi) d\zeta \quad (3.56)$$

А вирази для похідних, з врахуванням (3.8) мають вигляд:

$$\dot{\nu} = 0 \quad (3.57)$$

$$\dot{\tilde{\xi}} = \frac{\hbar}{m^*} \mu \quad (3.58)$$

$$\dot{\mu} = -\varepsilon \left(\tilde{\xi} \cos^2 \Omega \tau + \tilde{x}_0 \cos \Omega \tau + \frac{2\nu Jg}{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sh}(\zeta)}{\operatorname{ch}^3(\zeta)} \rho_1 d\zeta \right) \quad (3.59)$$

$$\dot{\eta} = 2(\nu^2 + \mu^2) - \varepsilon \left(-\frac{\pi^2 \cos^2 \Omega \tau}{12 \cdot 4\kappa^2} + (\tilde{\xi} \cos \Omega \tau + \tilde{x}_0)^2 + \right. \\ \left. + \frac{2Jg}{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{\text{ch}^2(\zeta)} - \zeta \frac{\text{sh}(\zeta)}{\text{ch}^3(\zeta)} \right) \rho_1 d\zeta \right) \quad (3.60)$$

Тобто параметри солітона (амплітуда, ширина, координата центру мас) задаються функціями, що істотно залежать від часу та містять гармоніки з частотою зовнішнього поля та кратними їй. Також до даних виразів входить член, який відповідає за реакцію ґратки ланцюжка (зміну деформації). Це відображає поправку, яка описана в рівняннях (3.1) і (3.2) та показує в явному вигляді залежність зміни параметрів солітона від реакції ґратки. При наявності зовнішнього випромінювання солітон може змінювати свої властивості чи навіть ставати нестабільним, що впливає на процеси транспорту зарядів.

3.4. Динамічна маса солітона у змінному магнітному полі

У попередніх розділах нами були розраховані параметри солітона у магнітному полі в адіабатичному наближенні теорії збурень без урахування зміни маси солітона за рахунок самоузгодженого врахування зміни деформації ланцюжка під впливом зміни електронної компоненти. Незважаючи на те, що ця зміна є слабкою, її послідовне врахування може призвести до якісних наслідків, зокрема до зміни динамічної маси солітона та її залежності від частоти магнітного поля, як це показано нижче.

Вираз для похідної від координати центру мас має вигляд:

$$\dot{\tilde{\xi}} = \frac{\hbar}{m_*} \mu \quad (3.61)$$

Шукаємо рівняння руху для координати центру мас. Необхідно отримати вираз для прискорення та привести рівняння до Ньютонівського.

$$\ddot{\xi} = \frac{\hbar}{m^*} \dot{\mu} \quad (3.62)$$

Де $\dot{\mu}$ визначається з виразу (3.59):

$$\dot{\mu} = -\varepsilon \left(\xi \cos^2 \Omega \tau + \tilde{x}_0 \cos \Omega \tau + \frac{2\kappa Jg}{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{sh}(\zeta)}{\text{ch}^3(\zeta)} \rho_1 d\zeta \right) \quad (3.63)$$

Враховуючи попередні результати (3.14), для координати центру мас солітона маємо рівняння руху типу рівняння Ньютона для частинки під дією зовнішньої періодичної сили:

$$m^* \ddot{\xi}(t) + \int_0^{\infty} \ddot{\xi}(t - \tilde{\tau}) Q(\tilde{\tau}) d\tilde{\tau} = F_0 \sin(\omega t) \quad (3.64)$$

тут m^* – ефективна маса квазічастинки:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2Ja^2} \quad (3.65)$$

Отримане рівняння описує рух квазічастинки під дією зовнішньої періодичної сили з амплітудою F_0 та ядром $Q(\tilde{\tau})$, яке дозволяє пояснити запізнену дію деформації ланцюжка [29].

$$Q(\tilde{\tau}) = \frac{\sigma^2 a v}{V_0^2} \frac{d}{d\tilde{\tau}} \frac{v V_0 \tau \text{ch}(v V_0 \tilde{\tau}) - \text{sh}(v V_0 \tilde{\tau})}{\text{sh}^3(v V_0 \tilde{\tau})} \quad (3.66)$$

А зовнішня сила F_0 задається як результат дії магнітного поля і має вигляд:

$$F_0 = e\omega B_0 x \sin \omega t \quad (3.67)$$

Розв'язок для координати центру мас можна представити у вигляді:

$$\ddot{\xi}(t) = \frac{F_0}{m_d(\omega)} \sin(\omega t - \phi(\omega)) \quad (3.68)$$

в якому $m_d(\omega)$ – величина, фізичний зміст якої є динамічна маса солітона, що залежить від ω , а $\phi(\omega)$ є зсувом фази осциляцій швидкості солітона.

Динамічна маса солітона $m_d(\omega)$, згідно з [29], визначається:

$$m_d \approx m^* + \frac{m^* \sigma^4 a^2}{6\hbar^2 \kappa V_0^2} \quad (3.69)$$

Динамічна маса солітона відрізняється від маси вільного солітона та від циклотронної маси електрона. Вона залежить від частоти магнітного поля та його інтенсивності.

Наявність характеристичної частоти солітона, по відношенню до якої вплив магнітного поля відрізняється для низькочастотного та високочастотного режимів.

3.5. Випромінювання солітоном, зумовлене магнітним полем

Визначимо деформацію ланцюжка, виходячи з отриманого рівняння руху (3.13). Як зазначалось в (3.14), розв'язок матиме вигляд:

$$\rho_1 = -\frac{\sigma a}{2\pi \kappa V_0} \int_{-\infty}^t dt' \ddot{\xi}(t') \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{\sin[V_0 q(t-t')]}{q} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{iq(x-x')} \frac{\partial |\psi_s(x', t')|^2}{\partial x'} \quad (3.70)$$

Інтегруванням визначаємо:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{iq(x-x')} \frac{\partial |\psi_s(x', t')|^2}{\partial x'} = -8v^2 e^{iq(x-\xi)} \left(1 - \frac{iq^2 \pi}{8v^2} \frac{1}{\text{sh} \frac{q\pi}{4v}} \right) \quad (3.71)$$

$$-8\nu^2 \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{\sin[V_0 q(t-t')]}{q} e^{iq(x-\xi)} \left(1 - \frac{iq^2 \pi}{8\nu^2} \frac{1}{\operatorname{sh} \frac{q\pi}{4\nu}} \right) = \pi \left\{ |\psi_s(\xi_+)|^2 - |\psi_s(\xi_-)|^2 \right\} \quad (3.72)$$

Тут для хвильової функції:

$$|\psi_s(\xi_{\pm})|^2 = 4\nu^2 \operatorname{sech}^2 \left[2\nu(x - \xi \pm V_0 \tau) \right] \quad (3.73)$$

Для ρ_1 маємо вираз:

$$\rho_1 = -\frac{\sigma a}{2\kappa V_0} \int_0^{\infty} \ddot{\xi}(t - \tilde{\tau}) \left\{ |\psi_s(\xi_+)|^2 - |\psi_s(\xi_-)|^2 \right\} d\tilde{\tau} \quad (3.74)$$

Який за допомогою (3.67) виглядає наступним чином:

$$\rho_1 = -\frac{\sigma a}{2\kappa V_0} \int_0^{\infty} e\omega B_0 x \sin(\omega(t - \tau) - \phi(\omega)) \left\{ |\psi_s(\xi_+)|^2 - |\psi_s(\xi_-)|^2 \right\} d\tau \quad (3.75)$$

Отриманий вираз (3.75) містить інтеграл, який не має точного аналітичного виразу, але такий, що може бути розрахований аналітично наближено. Бачимо, що поправка до деформації ланцюжка залежить від амплітуди та частоти зовнішнього магнітного поля, а також від електронної складової самого солітона. Координата центру мас солітона (3.68) є осцилюючою функцією часу з частотою магнітного поля та вищими гармоніками. Така зміна параметрів електронної складової солітона і призводить до зміни деформації (реакція ґратки молекулярного ланцюжка).

Як зазначалось, (3.75) містить інтеграл, який не має точного аналітичного виразу, але його можна розділити на проміжки:

$$\rho_1(x, t) = \begin{cases} A(\omega) \cos \left[\omega \left(t - \frac{(x - \xi)}{V_0} \right) - \phi \right], & (x - \xi) \rightarrow \infty \\ -A(\omega) \cos \left[\omega \left(t + \frac{(x - \xi)}{V_0} \right) - \phi \right], & (x - \xi) \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (3.76)$$

Тут амплітуда:

$$A(\omega) = \frac{\sigma a \omega F_0}{2m_d \kappa V_0^2 \omega_0} \sinh^{-1} \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right) \quad (3.77)$$

$$\omega_0 \equiv \frac{2\kappa V_0}{\pi} \quad (3.78)$$

Асимптотика $(x - \xi) \rightarrow \infty$ описує випромінювання звукових хвиль попереду солітона, а $(x - \xi) \rightarrow -\infty$ – позаду.

Перевіримо отриманий результат графічно. Для цього дослідимо поведінку підінтегральної функції виразу (3.75), а саме функцію виду:

$$I = \sin(bx - \phi) \{ \operatorname{sech}^2(x + a) - \operatorname{sech}^2(x - a) \} \quad (3.79)$$

Тут a і b – деякі параметри, значення яких підбираємо вручну для дослідження поведінки функції. Значення фази ϕ не впливатиме на графічну залежність, тому можемо обрати довільним (нехай $\phi = 1$). А параметр b впливає на кількість пічків графіка. Для графічного дослідження функції оптимально обрати значення $b = 4$ – таким чином різниця амплітуд буде найкраще відображена. А вже значення параметра a будемо змінювати: Рис.3.1-Рис.3.5.

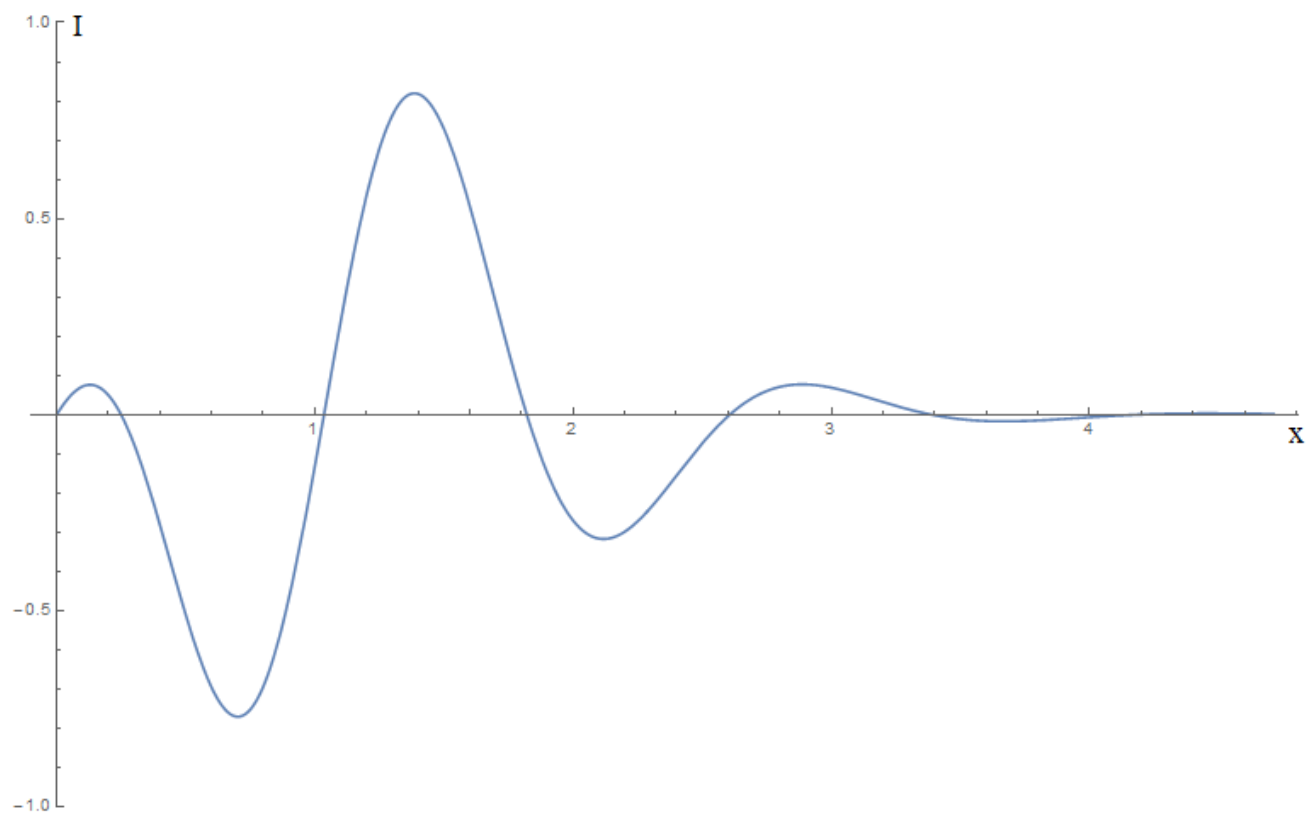


Рис.3.1 Графік функції (3.79) при $a = 1$: $\sin[4x - 1]\{(\operatorname{sech}^2[x + 1] - \operatorname{sech}^2[x - 1])\}$

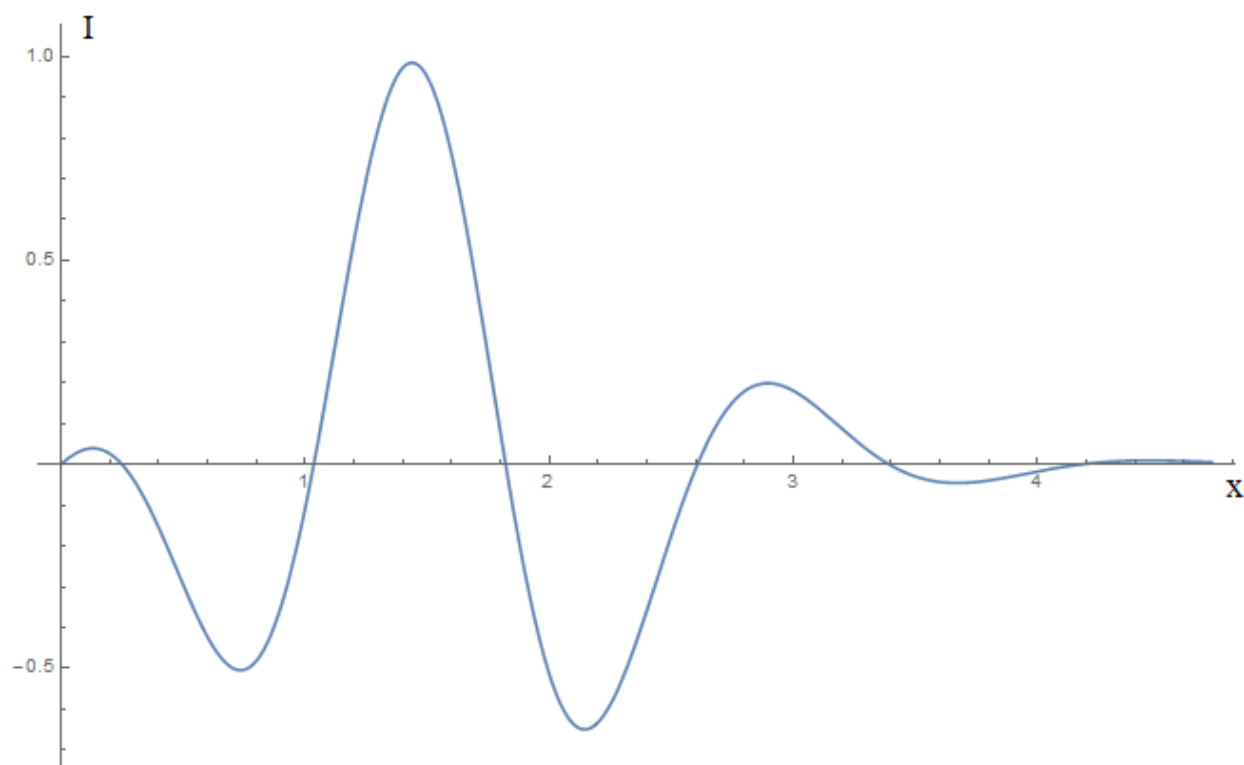


Рис.3.2 Графік функції (3.79) при $a = 1,5$:
 $\sin[4x - 1]\{(\operatorname{sech}^2[x + 1,5] - \operatorname{sech}^2[x - 1,5])\}$

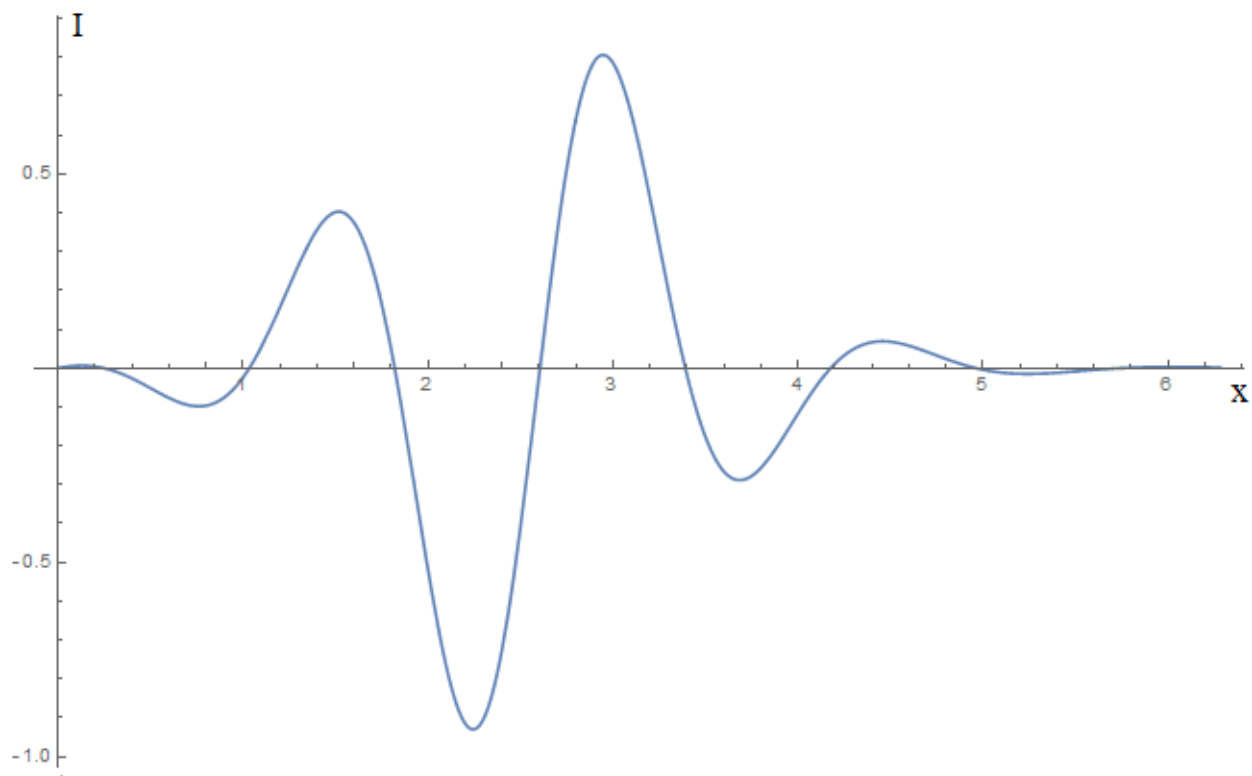


Рис.3.3 Графік функції (3.79) при $a = 2,5$:
 $\sin[4x - 1]\{(\operatorname{sech}^2[x + 2,5] - \operatorname{sech}^2[x - 2,5])\}$

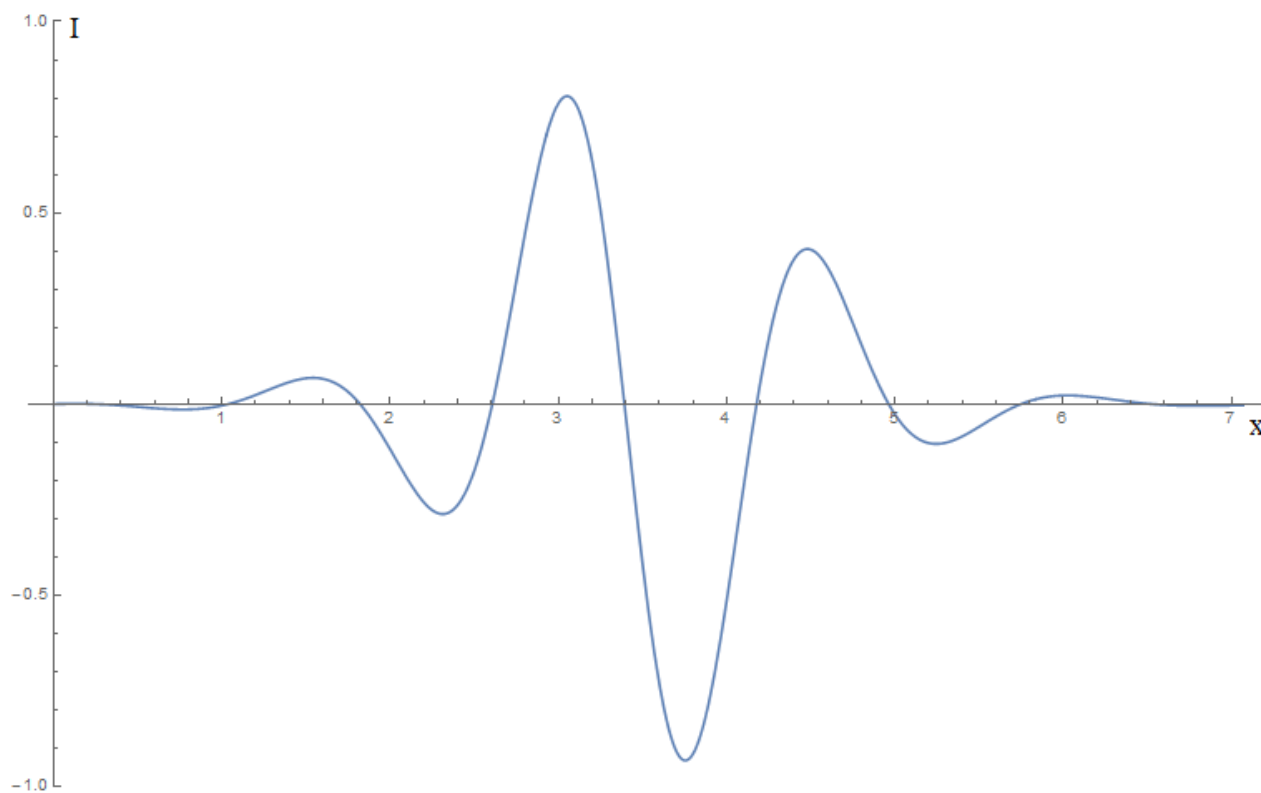


Рис.3.4 Графік функції (3.79) при $a = 3,5$:
 $\sin[4x - 1]\{(\operatorname{sech}^2[x + 3,5] - \operatorname{sech}^2[x - 3,5])\}$

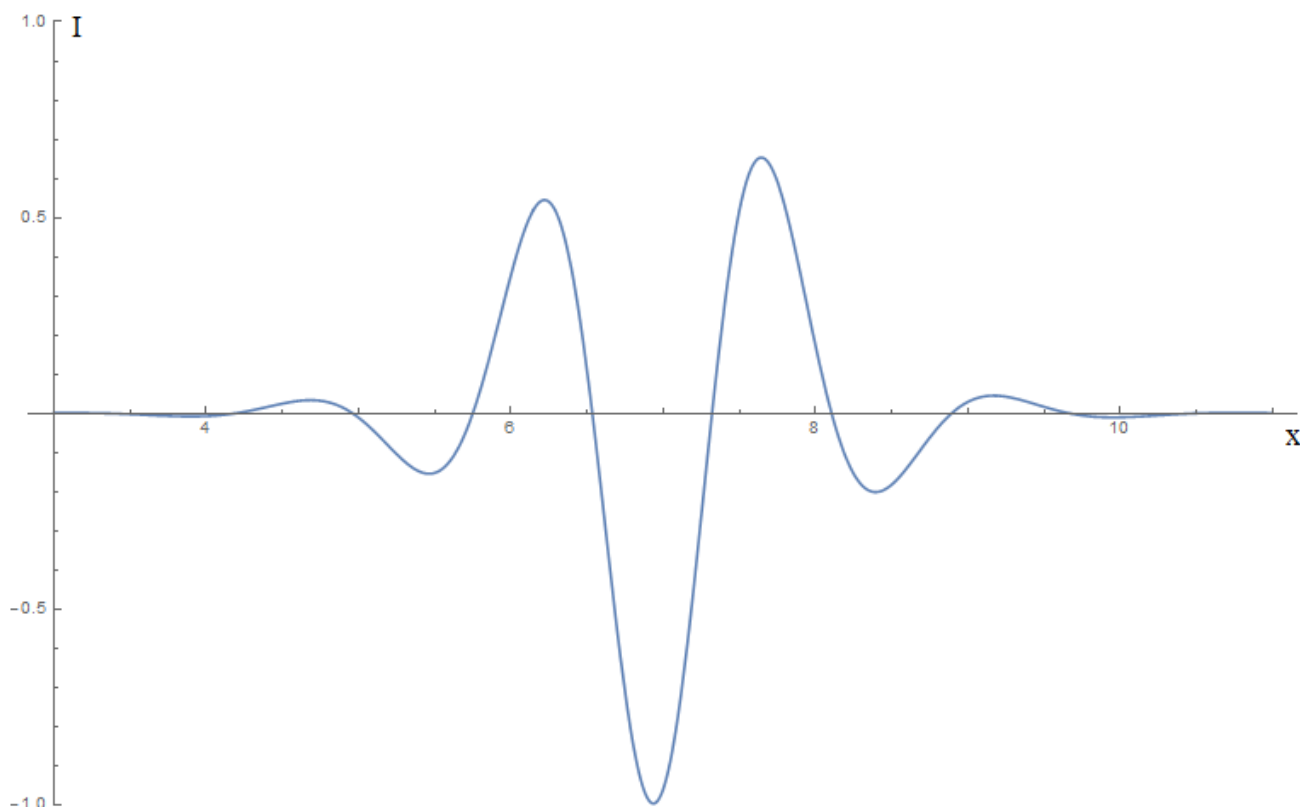


Рис.3.5 Графік функції (3.79) при $a = 7$: $\sin[4x-1]\{\operatorname{sech}^2[x+7]-\operatorname{sech}^2[x-7]\}$

Тобто результати показують, що реакція ґратки ланцюжка на зміну електронної складової солітона має різний характер в залежності від положення самого солітона. Крім того, вона залежить також і від амплітуди та частоти зовнішнього поля.

Такий складний вплив на динаміку солітонів відображається на зміні процесів транспорту електронів у низькорозмірних молекулярних системах та макромолекулах.

Висновки до розділу 3

Таким чином, в цьому розділі було показано, що у зовнішньому періодичному магнітному полі змінюються параметри солітона такі, як амплітуда, ширина та координата центру мас, та змінюється зовнішній вигляд огинаючої солітона. Зокрема ці величини набувають залежності від амплітуди

та частоти магнітного поля, а координата центру мас залишаючи загальний вираз біжучої координати, набуває додаткової залежності від часу. Вона стає осцилюючою функцією часу з частотою магнітного поля та частотами вищих гармонік. Зміна параметрів електронної компоненти солітона призводить і до зміни деформації ланцюжка. Координата центру мас солітона задовольняє рівняння руху типу рівняння Ньютона під дією зовнішньої періодичної сили, а динамічна маса солітона стає залежною від амплітуди і частоти магнітного поля також. Крім того, у змінному магнітному полі солітон випромінює звукові та електро-магнітні хвилі малої амплітуди, згасаючи у часі та просторі. При цьому випромінювання йде як у прямому, так і у зворотньому до руху солітона напрямку.

Результати показують, що реакція ґратки ланцюжка на зміну електронної складової солітона має різний характер в залежності від руху самого солітона. Крім того, вона залежить також і від амплітуди та частоти зовнішнього поля.

Динамічна маса солітона відрізняється від маси вільного солітона та від циклотронної маси електрона. Вона складним чином залежить від частоти магнітного поля та його інтенсивності. Показано наявність характеристичної частоти солітона, по відношенню до якої вплив магнітного поля відрізняється для низькочастотного та високочастотного режимів.

РОЗДІЛ 4

Врахування ефектів дисипації енергії солітона в магнітному полі

Досі ми розглядали динаміку солітона в зовнішньому магнітному полі без врахування дисипації енергії. В реальних молекулярних ланцюжках відбувається гальмування солітона за рахунок середовища. Крім того, як було показано в попередньому розділі, солітон за рахунок зміни параметрів випромінює звукові хвилі, втрачаючи таким чином енергію і гальмуючи.

В даному розділі враховується механізм дисипації енергії, а саме гальмування солітона. Крім того, на основі отриманих раніше результатів динаміки системи, показана модель коливального руху молекул за рахунок солітонного збудження. Викладаються основні принципи дисипації енергії солітона, виводяться рівняння руху за рахунок гальмування. Подаються вирази для параметрів солітона у випадку дисипації та аналізується роль ефектів гальмування.

4.1. Моделювання молекулярного ланцюжка з надлишковим електроном за відсутності зовнішнього магнітного поля

Біологічні макромолекули, такі як білки, ДНК, РНК, мають складну будову - вони «зібрані» з більш простих молекул. Математичне моделювання процесів переносу заряду в біологічних системах пов'язано з використанням дискретних моделей, в яких розглядаються шляхи переносу заряду в макромолекулах. Такі моделі враховують різні можливі взаємодії частинки з ланцюжком, але побудовані на загальних принципах [33].

Молекулярний ланцюжок наближено моделюється дискретним ланцюжком, що складається з молекул (або групи сильно пов'язаних атомів, які

взаємодіють між собою порівняно слабкими силами). У ланцюжок вноситься надлишковий заряд (електрон або дірка). Поширення заряду впливає на рух молекул, і навпаки, зміщення молекул суттєво змінює ймовірність знаходження заряду на ньому. Заряд розглядається як квантова (нерелятивістська) частинка. Поширення заряду описується рівняннями Шредінгера, а коливання макромолекул - класичними рівняннями руху.

Було проведено чисельне інтегрування системи (2.4)-(2.5) для однорідного ланцюжка із 1000 макромолекул. Розрахунки проводились явним методом Рунге–Кутта 4-го порядку.

Ланцюжок незбурений - молекули знаходяться в рівноважному положенні, швидкості нульові. У початковий момент заряд «виникає» на першій молекулі довгого ланцюжка (біля лівого краю). Тобто початкові дані для розрахунків:

$$b_1(0)=1, \quad b_2(0)=b_3(0)=\dots=b_N(0)=0, \quad u_n=0, \quad \dot{u}_n=0 \quad (4.1)$$

тут b_N – ймовірність знаходження заряду на молекулі N , u_n – зміщення молекул, n – номер вузла розташування молекули масою M .

Через деякий час утворюється стійка усамітнена хвиля, яка рухається. Цей момент приймаємо за початковий. Форма такої усамітненої хвилі відрізняється від стоячої хвилі (Рис.4.1) та має більшу енергію.

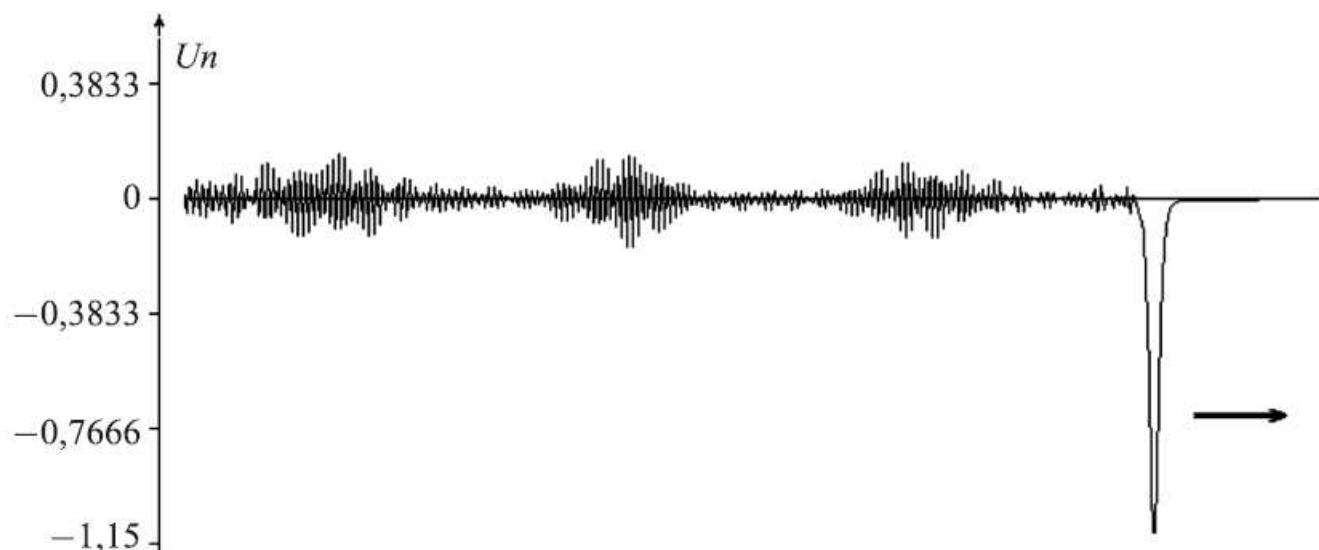


Рис.4.1 Коливання молекул ланцюжка внаслідок солітонного збудження

Тут U_n — характерний розмір зміщень n -ї молекули.

Розрахунки проводились при наступних значеннях параметрів. Вибираєм характерний для переносу заряду в ДНК час $\tau = 10^{-14}$ сек; маса молекул $M = 6,25 \cdot 10^{-23}$ г; частота коливань $\omega \approx 3 \cdot 10^{13}$ сек $^{-1}$; параметр зв'язку $\chi = 0,163$ еВ/А; енергія резонансної взаємодії: $J = 0,0066$ еВ.

4.2. Нелінійне рівняння Шредінгера з дисипацією енергії

Оскільки в даній задачі рух солітона описується нелінійним рівнянням Шредінгера, опишемо ефективні сили тертя, які пропорційні швидкості солітона [34]. Для цього введемо в рівняння, яке визначає хвильову функцію солітона $\psi_s(x, t)$, оператор V_F , що відповідає дисипації енергії.

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \sigma \rho(x, t) \right] \psi_s(x, t) = \frac{1}{2m_z} \left(\hbar k_z + \frac{e}{c} B_0 x \cos \omega t \right)^2 \psi_s(x, t) + V_F \psi_s(x, t) \quad (4.2)$$

Вимагатимемо, щоб в рівнянні (4.2) початкова умова для $\psi_s(x, t)$ співпадала з початковою умовою для вільних солітонів,

$$\psi_s(x, t) = \psi_{s0}(x) \quad (4.3)$$

а також щоб розв'язок (4.2) співпадав з розв'язком для вільних солітонів за умови коли коефіцієнт тертя $\gamma \rightarrow 0$.

Оператор V_F виберемо із умови виконання теореми Еренфеста, яку в даному випадку для $P = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$ запишемо у вигляді

$$\langle \dot{P}(t) \rangle = -\gamma \langle P(t) \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial x} (\sigma \rho(x, t)) \right\rangle \quad (4.4)$$

Враховуючи те, що похідна по часу від хвильової функції $\frac{\partial \psi_s(x, t)}{\partial t}$ визначається з виразу (4.2), отримуємо:

$$\int \psi_s^* \frac{\partial V_F}{\partial x} \psi_s dx = \frac{\hbar \gamma}{2i} \int \left(\psi_s^* \frac{\partial \psi_s}{\partial x} - \frac{\partial \psi_s^*}{\partial x} \psi_s \right) dx \quad (4.5)$$

тут ψ_s^* – комплексно спряжена до ψ_s функція.

Рівняння (4.5) задовольняється для будь-яких $\psi_s(x, t)$, якщо виконується умова:

$$\frac{\partial V_F}{\partial x} = \frac{\hbar \gamma}{2i} \frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{\psi_s}{\psi_s^*} \quad (4.6)$$

З виразу (4.6) випливає:

$$V_F = \frac{\hbar \gamma}{2i} \ln \frac{\psi_s}{\psi_s^*} + W(t) \quad (4.7)$$

тут $W(t)$ – стала інтегрування, а коефіцієнт тертя $\gamma = const$.

Сталу інтегрування вибираємо з умови, щоб збереглося загальноприйняте відношення між середніми значеннями гамільтоніана і суми кінетичної та потенціальної енергій:

$$W(t) = -\frac{\hbar\gamma}{2i} \left\langle \ln \frac{\psi_s}{\psi_s^*} \right\rangle \quad (4.8)$$

Звідси отримуємо вираз для оператора дисипації енергії

$$V_F = \frac{\hbar\gamma}{2i} \left(\ln \frac{\psi_s}{\psi_s^*} - \left\langle \ln \frac{\psi_s}{\psi_s^*} \right\rangle \right) \quad (4.9)$$

4.3. Рівняння руху солітона в магнітному полі з врахуванням дисипації енергії

Розглянемо динаміку солітона в поперечному осцилюючому магнітному полі з врахуванням дисипації енергії.

Нехай поле задано наступним чином:

$$\vec{B}(t) = (0, B_0 \cos \omega t, 0) \quad (4.10)$$

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

$$\vec{A} = (0, 0, -B_0 x \cos \omega t) \quad (4.11)$$

Таким чином, вираз для повного гамільтоніану представляється рівняннями (2.10) та (2.11).

Тоді рівняння Шредінгера з врахуванням тертя для солітона матиме вигляд:

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \sigma \rho(x, t) \right] \psi_s(x, t) =$$

$$= \frac{1}{2m_z} \left(\hbar k_z + \frac{e}{c} B_0 x \cos \omega t \right)^2 \psi_s(x, t) + \frac{\hbar \gamma}{2i} \left(\ln \frac{\psi_s}{\psi_s^*} - \left\langle \ln \frac{\psi_s}{\psi_s^*} \right\rangle \right) \psi_s(x, t) \quad (4.12)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - V_0^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \rho(x, t) + \frac{\sigma a^2}{M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} |\psi(x, t)|^2 = 0 \quad (4.13)$$

Система рівнянь руху для електронної та фононної підсистем складається з рівняння (4.12) та рівняння (4.13).

Як було зазначено в підрозділі 3.1, розв'язок для деформації ланцюжка

$\rho(x, t)$ має вигляд:

$$\rho(x, t) = \rho_0(x, t) + \varepsilon \rho_1(x, t) \quad (4.14)$$

в якому

$$\rho_0(x, t) = \frac{\sigma}{\kappa(1-s^2)} |\psi_s(x, t)|^2 \quad (4.15)$$

$$\rho_1(x, t) = \begin{cases} A(\omega) \cos \left[\omega \left(t - \frac{(x-\xi)}{V_0} \right) - \phi \right], & (x-\xi) \rightarrow \infty \\ -A(\omega) \cos \left[\omega \left(t + \frac{(x-\xi)}{V_0} \right) - \phi \right], & (x-\xi) \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (4.16)$$

Шукаємо розв'язок рівняння (4.12) у вигляді

$$\psi_s(x, t) = \sqrt{l_0} D(x, t) e^{\frac{i}{\hbar} \theta(t)} \quad (4.17)$$

тут l_0 - коефіцієнт нормування хвильової функції, фаза визначається наступним чином:

$$\theta(t) = -e^{-\gamma t} \int_0^t e^{\gamma \tau} W(\tau) d\tau \quad (4.18)$$

Підставимо вираз для хвильової функції (4.17) в рівняння Шредінгера з врахуванням дисипації енергії (4.12) та зведемо це рівняння до безрозмірного вигляду. Для цього введемо такі заміни змінних:

$$\tilde{x} = \sqrt{g} \frac{x}{a}, \quad \tilde{x}_0 = \frac{\sqrt{g} \hbar c k_z}{aeB_0} \quad (4.19)$$

$$\tau = 2 \frac{Jgt}{\hbar}, \quad \Omega = \frac{\omega \hbar}{2Jg} \quad (4.20)$$

Таким чином отримуємо нелінійне рівняння Шредінгера з правою частиною:

$$i \frac{\partial D}{\partial \tau} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 D}{\partial \tilde{x}^2} + |D|^2 D = i\varepsilon R[D] \quad (4.21)$$

в якому

$$R[D] = -i \left[(\tilde{x} \cos \Omega \tau + \tilde{x}_0)^2 - \frac{\sigma}{2Jg} \rho_1(\tilde{x}, \tau) \right] D - \frac{\gamma}{4Jg\varepsilon} D \ln \frac{D}{D^*} \quad (4.22)$$

Розглянемо рівняння (4.21). Величину $\varepsilon R[D]$ можна розглядати як мале збурення точно інтегрованого нелінійного рівняння Шредінгера з кубічною нелінійністю. Як вже було зазначено, для розв'язку такого типу рівнянь можна скористатися теорією збурень, розвинутою на основі методу оберненої задачі розсіювання.

Відповідно до цього, шукатимемо розв'язок у вигляді:

$$D(x, t) = D_s(x, t) + \delta D(x, t) \quad (4.23)$$

де в адіабатичному наближенні знехтуємо зміною форми солітона.

Розв'язок рівняння (4.21), як було зазначено в підрозділі 3.1, шукатимемо у вигляді:

$$D_s(\tilde{x}, \tau) = 2\nu \operatorname{sech} \zeta \exp[i\varphi] \quad (4.24)$$

тут

$$\zeta = 2\nu(\tilde{x} - \tilde{\xi}), \quad \varphi = \frac{\mu\zeta}{\nu} + \eta \quad (4.25)$$

Відповідно до теорії збурень, параметри ν , μ , $\tilde{\xi}$, η залежать від часу та визначаються з рівнянь (3.53)-(3.56).

Підставляючи вираз (4.24) в рівняння (4.22) отримуємо:

$$R[D] = -2i\nu \operatorname{sech} \zeta \exp[i\varphi] \left\{ (\tilde{x} \cos \Omega \tau + \tilde{x}_0)^2 - \frac{\sigma}{2Jg} \rho_1(\tilde{x}, \tau) + \gamma^* \varphi \right\} \quad (4.26)$$

в якому

$$\gamma^* = \frac{\gamma}{2Jg\varepsilon} \quad (4.27)$$

Підставляючи (4.25) і (4.26) в рівняння (3.53)-(3.56) та інтегруючи їх, знаходимо вирази для похідних параметрів ν , μ , $\tilde{\xi}$, η :

$$\frac{d\nu}{d\tau} = 0 \quad (4.28)$$

$$\frac{d\tilde{\xi}}{d\tau} = 2\mu \quad (4.29)$$

$$\frac{d\mu}{d\tau} = -\varepsilon \left[\tilde{\xi} \cos^2 \Omega \tau + \tilde{x}_0 \cos \Omega \tau + \frac{2\nu Jg}{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sh}(\zeta)}{\operatorname{ch}^3(\zeta)} \rho_1 d\zeta + \gamma^* \mu \right] \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\eta}{d\tau} = & 2(\nu^2 + \mu^2) + \varepsilon \left(\frac{\pi^2 \cos^2 \Omega \tau}{12} - \frac{\cos^2 \Omega \tau}{4\kappa^2} - (\tilde{\xi} \cos \Omega \tau + \tilde{x}_0)^2 - \right. \\ & \left. - \frac{2Jg}{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{\operatorname{ch}^2(\zeta)} - \zeta \frac{\operatorname{sh}(\zeta)}{\operatorname{ch}^3(\zeta)} \right) \rho_1 d\zeta - \gamma^* \eta \right) \end{aligned} \quad (4.31)$$

Висновки до розділу 4

Випромінювання солітоном, що зумовлене зовнішнім магнітним полем, призводить до дисипації енергії солітона. Врахування так званого тертя приводить до модифікації залежності параметрів солітона від часу в поперечному магнітному полі:

- відбувається сповільнення зростання швидкості солітона порівняно з бездисипаційним рухом
- параметри солітона стають залежними не тільки від інтенсивності та частоти магнітного поля, а й від інтенсивності дисипації енергії.

ВИСНОВКИ

В даній роботі досліджується динаміка давидовського солітона (полярона великого радіусу) під впливом зовнішнього осцилюючого магнітного поля.

Наявність електрон-фононної взаємодії в молекулярних ланцюжках приводить до поляронних ефектів. Зокрема, при помірній електрон-фононній взаємодії електрон локалізується у солітонному стані, на зразок полярону великого радіусу. На відміну від загальноприйнятого визначення полярона великого радіусу, в солітонному розв'язку електрон-фононну взаємодію враховано точно, а не за теорією збурень. Вільний солітон за відсутності зовнішніх полів розповсюджується з постійною швидкістю, меншою за швидкість звуку і таким чином не випромінює звукових коливань.

Під впливом зовнішніх полів динаміка молекулярних солітонів змінюється. Особливе значення має зміна динамічної маси солітона, її залежність від частоти та інтенсивності зовнішнього поля та додаткове випромінювання солітоном згасаючих у часі та просторі звукових та електромагнітних хвиль.

Зазначаємо, що результати отримані без використання лінеаризації систем нелінійних рівнянь, що дозволяє повною мірою врахувати властивості солітонних розв'язків. А використаний метод теорії збурень, розвинутої на основі оберненої задачі розсіювання, має місце в дуже широкому інтервалі значень інтенсивностей магнітних полів: наші розрахунки показують, що навіть для полів великої інтенсивності ($B_0 = 1$ Тл) параметр в нелінійному рівнянні Шредінгера дорівнює $\varepsilon = 1,26 \cdot 10^{-24}$.

Було отримано такі основні результати:

1. Процеси переносу зарядів в молекулярних системах та, зокрема, динаміка давидовських солітонів змінюється під впливом зовнішнього періодичного магнітного поля.
2. У довільному випадку магнітне поле можна розкласти на поздовжню та поперечну відносно молекулярного ланцюжка компоненти. Динаміка електрона в ланцюжку за наявності зовнішнього поля істотно відрізняється для цих двох орієнтацій магнітного поля.
3. Найбільш якісні зміни динаміки електрона мають місце в полях з поперечною орієнтацією. В цьому випадку нелінійна система двох рівнянь може бути зведена у найнижчому порядку до нелінійного рівняння Шредінгера з правою частиною, яка залежить від частоти магнітного поля та його інтенсивності і є функцією, залежною від часу.
4. Параметри солітона такі, як амплітуда, ширина та координата центру мас змінюються у зовнішньому магнітному полі, також змінюється зовнішній вигляд огинаючої солітона. Ці величини набувають залежності від амплітуди та частоти магнітного поля, а координата центру мас залишаючи загальний вираз біжучої координати, набуває додаткової залежності від часу. Вона стає осцилюючою функцією часу з частотою магнітного поля та частотами вищих гармонік.
5. Зміна параметрів електронної компоненти солітона призводить і до зміни деформації ланцюжка.
6. Координата центру мас солітона задовольняє рівняння руху типу рівняння Ньютона під дією зовнішньої періодичної сили, а динамічна маса солітона стає залежною від амплітуди і частоти магнітного поля також.
7. У змінному магнітному полі солітон випромінює звукові та електромагнітні хвилі малої амплітуди, згасаючі у часі та просторі. При цьому

випромінювання йде як у прямому, так і у зворотньому до руху солітона напрямку.

8. Реакція ґратки молекулярного ланцюжка на зміну електронної складової солітона має різний характер в залежності від положення самого солітона. Крім того, вона залежить також і від амплітуди та частоти зовнішнього поля.
9. Динамічна маса солітона відрізняється від маси вільного солітона та від циклотронної маси електрона. Вона складним чином залежить від частоти магнітного поля та його інтенсивності.
10. Показано наявність характеристичної частоти солітона, по відношенню до якої вплив магнітного поля відрізняється для низькочастотного та високочастотного режимів.
11. Врахування дисипації енергії приводить до модифікації залежності параметрів солітона від часу в поперечному магнітному полі. Солітон за рахунок зміни параметрів випромінює хвилі, втрачаючи таким чином енергію і гальмуючи.
12. Отримані результати можуть бути використані в області мікро- та наноелектроніки. Актуальним є питання 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.
13. Важливе значення має 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.

14. Магнітні поля можна використовувати як засоби контролю над процесами накопичення та передачі інформації в низькорозмірних молекулярних системах. Особливо з врахуванням того факту, що застосування сучасних методів мікрохвильової терапії постійно зростає в сучасній медицині та використовується для діагностики та лікування широкого спектра захворювань.
15. В залежності від параметрів магнітного поля, ефекти впливу його на молекулярні системи можуть бути як корисними, так і згубними.

Рекомендації щодо подальших досліджень

Для наступних досліджень в межах даної задачі пропонується для реалістичності моделі зробити наступні доповнення:

1. Врахування реалістичної структури молекулярного ланцюжка, зокрема білкової молекули.
2. Врахування впливу середовища, зокрема водного та йонного середовища для білкових молекул.
3. Розвиток теорії солітонів у магнітному полі з урахування спіну електронів для багатоелектронних задач.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Темченко К. В., Брижик Л. С. Давидовський солітон в зовнішньому магнітному полі: роль деформації ланцюжка — Доповідь на XV Науковій конференції студентів, аспірантів та молодих вчених на базі Фізико-технічного інституту НТУУ «КПІ», 2018.
2. Брандт Н. Б., Кульбачинский В. А. Квазичастицы в физике конденсированного состояния. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. — 632 с.
3. Gardner C. S., Greene J. M., Kruskal M. D., Miura R. M. Method for solving the Korteweg-deVries equation — *Physical Review Letters*, 1967, v.19 — p.1095-1097.
4. Lax P.D. Integrals of nonlinear equations of evolution and solitary waves — *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 1968, v.21 — p.467-490.
5. Захаров В. Е., Шабат А. Б. Точная теория двумерной фокусировки в одномерной автомодуляции волн в нелинейных средах — *ЖЭТФ*, 1971, № 61. — 118-134 с.
6. Cruzeiro, L. Why are proteins with glutamine- and asparagine-rich regions associated with protein misfolding diseases? — *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2005, v. 17, — 7833-7844.
7. McClare, C.W.F. Resonance in bioenergetics — *Annals of the New York Academy of Sciences*, 1974, v. 227 — p.74-97.
8. Turin, L. Colin McClare (1937–1977): a tribute — *Journal of Biological Physics*, 2009, 35(1) — p.9-15.
9. Davydov, A.S. The theory of contraction of proteins under their excitation — *J. Theor. Biol.*, 1973, 38, — p.559–569.
10. Давыдов А. С. Солитоны в молекулярных системах — К. : Наукова думка, 1988.— 304 с.
11. Scott A. C. Davydov's soliton — *Physics Reports*, 1992, v. 217 — p.1-67.

12. Grundler, W., Kaiser, F., Keilmann, F. and Walleszhek, J. Mechanisms of electromagnetic interaction with cellular systems — *Naturwissenschaften*, 2002, 79 — p.551–559.
13. 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 — p.223-232.
14. Филиппов А. Т. Многоликий солитон — М. : Наука, 1990.— 288 с.
15. Давыдов А. С. Солитоны в молекулярных системах— К. : Наукова думка, 1988.— 304 с.
16. Cruzeiro L. The Davydov/Scott Model for Energy Storage and Transport in Proteins — *Journal of Biological Physics*, 2009, 35(1) — p.43-55.
17. Wang P., Xiao S.-H., Chen L. Analytical study on the generalized Davydov model in the alpha helical proteins — *Modern Physics Letters B*, 2017, v. 31(16) — p.63-76.
18. Reshetnyak S. A., Shcheglov V. A., Blagodatskikh V. I. Mechanisms of Interaction of Electromagnetic Radiation with a Biosystem — *Laser Physics*, 2006, v. 6, No. 4 — p. 621-653.
19. Geesink J. H., Meijer D. K. F. Bio-soliton model that predicts non-thermal electromagnetic frequency bands, that either stabilize or destabilize living cells — *Electromagnetic Biology and Medicine*, 2017, 36(4) — p. 357-378.
20. Geesink J. H., Meijer D. K. F. Cancer is promoted by cellular states of electromagnetic decoherence and can be corrected by exposure to coherent non-ionizing electromagnetic fields. A physical model about cell-sustaining and cell-decaying soliton eigen-frequencies — *Electromagnetic Biology and Medicine*, 2017, 35(3) — p. 132-168.
21. Темченко К. В. Динаміка давидовських солітонів у зовнішньому осцилюючому магнітному полі — Дипломна робота на здобуття ступеня бакалавра, К.: НТУУ «КПІ», 2016 — 54 с.
22. Темченко К. В., Брижик Л. С. Динаміка давидовського солітона в осцилюючому магнітному полі, спрямованому вздовж молекулярного

- ланцюжка — Доповідь на XIV Науковій конференції студентів, аспірантів та молодих вчених на базі Фізико-технічного інституту НТУУ «КПІ», 2016.
23. Темченко К. В., Брижик Л. С. Вплив осцилюючого магнітного поля, перпендикулярного молекулярним ланцюжкам, на динаміку молекулярних солітонів — Доповідь на XIV Науковій конференції студентів, аспірантів та молодих вчених на базі Фізико-технічного інституту НТУУ «КПІ», 2016.
 24. Arico A. S., Bruce P., Scrosati B. and others Nanostructured materials for advanced energy conversion and storage devices — *Nature Materials*, 2005, v. 4 — p.366-377.
 25. Давидов А. С., Кислуха Н. И. Солитоны в одномерных молекулярных цепях — *ЖЭТФ*, 1976, 71, № 9. — 1090-1098 с.
 26. Бинги В. М. Принципы электромагнитной биофизики — М. : ФизМатЛит, 2011. — 592 с.
 27. Thompson S. T., Hodby E., Wieman C. E. Ultracold Molecule Production Via a Resonant Oscillating Magnetic Field — *Physical Review Letters*, 2005, 95, id190404.
 28. Brizhik L. S. Bisoliton in Constant Magnetic Field — *Physica Status Solidi*, 1990, v. 157 — p.649-655.
 29. Brizhik L., Cruzeiro-Hansson L., Eremko A. Influence of electromagnetic radiation on molecular solitons — *Journal of Biological Physics*, 1998, v. 24 — p.19-39.
 30. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика — М. : Наука, 1989. — 768 с.
 31. Karpman V. I., Maslov E. M. Perturbation theory for solitons — *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 1977, v. 73 — p.537-559.
 32. Брижик Л. С. Временная эволюция решений нелинейного уравнения Шредингера, — Препринт ИТФ-81-134Р, Киев, 1981.
 33. Лахно В. Д., Фиалко Н. С. Механизм остановки движущегося солитона в однородной молекулярной цепочке — Компьютерные исследования и моделирование т. 1, 2009, No 1 — с. 93–99.

34. Брижик Л. С. Торможение давыдовских солитонов в одномерных молекулярных системах, — Препринт ИТФ-80-78Р, Киев, 1980.
35. 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 — p.223-232.