Національна Академія наук України
Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова

На правах рукопису

Мінгалєєв
Сергій Федорович

ЕФЕКТИ ДАЛЕКОСЯЖНОСТІ І АНГАРМОНІЗМУ В НЕЛІНІЙНОМУ ТРАНСПОРТІ ЕНЕРГІЇ ТА ЗАРЯДУ

01.04.02 — Теоретична фізика

Автореферат дисертації
на здобуття вченого ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Київ— 1997

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в	*Інституті теоретичної фізики* *ім. М.М. Боголюбова НАН України*
Науковий керівник:	*доктор фіз.-мат. наук, професор* *Гайдідей Юрій Борисович*
Офіційні опоненти:	*доктор фіз.-мат. наук,* *Волков Сергій Наумович,* *доктор фіз.-мат. наук, професор,* *Давидова Тетяна Олександрівна*
Провідна організація:	*Київський національний університет,* *фізичний факультет,* *кафедра теоретичної фізики.*

Захист відбудеться „______“____________________ 199__ р. о(б) ____ на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 01.76.01 при Інституті теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова Національної Академії наук України (252143, м. Київ-143, вул. Метрологічна, 14-б).

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України.

Автореферат розісланий „______“____________________ 199__ р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради
доктор фіз.-мат. наук В.Є. КУЗЬМИЧЕВ

Загальна характеристика роботи

Актуальність теми. Протягом останніх десятиріч великого розвитку набула теорія нелінійних хвильових процесів. Це сталося завдяки відкриттю, у шістдесятих роках, солітонів — стійких локалізованих збуджень, які розповсюджуються без зміни своєї форми і пружньо взаємодіють один з одним при зіткненнях. Ці їх властивості роблять солітони ідеальними збудженнями для ефективного переносу на великі відстанні енергії, заряду та інформації в різноманітних фізичних системах. Прикладами можуть бути солітони на поверхні рідини і в плазмі, світлові імпульси в світловодах, кінки у магнетиках, бризери на Джозефсонівських контактах, нелінійні збудження у полімерах, біологічних макромолекулах та плівках Ленгмюра–Блоджетта … Звичайно при дослідженні цих систем обмежувалися степеневим розкладом нелінійних та дисперсійних доданків рівнянь руху, враховуючи при цьому лише найголовніші члени розкладу. Використання такого наближення часто приводить до цілком інтегровних рівнянь руху і дозволяє повністю описати властивості широколокалізованих солітонних збуджень малої амплітуди. Але це наближення виявляється неспроможним описати деякі яскраві якісні ефекти, властиві сильнолокалізованим збудженням. Одним із таких ефектів є, наприклад, загострення солітонів на поверхні рідини, пов'язане з насиченням дисперсії при великих значеннях хвильового вектора. Тому зараз має місце тенденція до ускладнення теоретичних моделей в напрямку врахування декількох, часто конкуруючих, типів нелінійності та уточнення їх конкретного (неполіноміального) вигляду, з одного боку, і використання неполіноміальних законів дисперсії із врахуванням конкуренції між далекосяжністю дисперсійних взаємодій та дискретністю системи, з іншого.

Саме в цих напрямках й проводяться дослідження у данній дисертаційній роботі, причому в якості основної досліджуваної фізичної системи розглядається одновимірний ангармонічний молекулярний ланцюжок, вздовж якого можуть розповсюджуватися внутрішньомолекулярне збудження або надлишковий заряд, та згущення самого ланцюжка. При вивченні цієї системи використовується квазікласичний підхід А.С. Давидова. Хоча ця система інтенсивно вивчається вже більше десяти років, деякі питання залишаються ще недостатньо з'ясованими. Так, відомо, що наявність у системі двох типів нелінійності, екситон–фононного зв'язку та ангармонізму взаємодії сусідніх молекул, приводить до існування у ланцюжку двох видів солітонів, давидовського та акустичного. Тому виникає цікаве питання про характер взаємодії цих солітонів, — відповідь на нього го дається в першій главі дисертації. Відомо також, що внутрішньомолекулярне збудження переходить з однієї молекули на іншу за рахунок деякої нелокальної, найчастіше диполь–дипольної, резонансної взаємодії. Проте майже у всіх попередніх дослідженнях використовувалося наближення найближчих сусідів, яке спотворює закон дисперсії системи і тому не дає змоги описати деякі її цікаві властивості. Нові ефекти, пов'язані із врахуванням нелокального характеру міжмолекулярної дисперсійної взаємодії, вивчаються в другій та третій главах дисертації. При цьому вказується на важливість врахування просторової структури молекулярного ланцюжка.

Метою роботи є вивчення нових якісних ефектів, пов'язаних з наявністю в системі конкуруючих нелінійних та дисперсійних взаємодій, а саме:

- дослідження характеру взаємодії давидовського та акустичного солітонів в ангармонічних молекулярних ланцюжках в залежності від співвідношення рівнів двох конкуруючих типів нелінійності: екситон–фононного зв'язку та ангармонізму міжмолекулярної взаємодії ;
- вивчення властивостей давидовських солітонів при врахуванні нелокального характеру міжмолекулярної дисперсійної взаємодії в адіабатичному та гармонічному наближеннях, коли рівняння руху системи зводяться до нелокального нелінійного рівняння Шредінгера.

Наукова новизна одержаних результатів полягає у тому, що в дисертації було вперше:

- показано, що конкуруючий характер двох типів нелінійності (екситон–фононного зв'язку та ангармонізму) обумовлює нетривіальну залежність характера взаємодії давидовського і акустичного солітонів від співвідношення рівнів нелінійностей, приводячи до відштовхування солітонів при слабкому ангармонізмові та до утворення їх зв'язаного стану при сильному ангармонізмові ;
- запропоновано нелокальне нелінійне рівняння Шредінгера (НЛ–НРШ) для опису систем, закон дисперсії лінійних хвиль яких насичується при великих значеннях хвильового вектору ;
- знайдено нерухомі стаціонарні солітонні розв'язки НЛ–НРШ та показано, що, на відміну від звичайного НРШ, вони існують лише при рівні нелінійності системи, нижчому за певне критичне значення. При надкритичному рівні нелінійності має місце колапс хвильової функції.

- показано, що внаслідок неінваріантності рівняння відносно галілеєвих перетворень простору–часу, у НЛ–НРШ, на відміну від звичайного НРШ, не існує рухомих стаціонарних солітонних розв'язків: при зрушенні ж з місця нерухомого солітона, він починає непертурбативно випромінювати ;
- встановлено наявність бістабільності солітонних розв'язків у дискретному НЛ–НРШ у випадку, коли дисперсійна взаємодія між молекулами достатньо повільно ослаблюється з відстанню між ними;
- показано, що у випадку дискретного НЛ–НРШ із степеневою нелокальністю можливі ситуації, коли солітонний розв'язок втрачає стійкість, а стійким стає екситонне збудження.

Теоретична і практична цінність. Результати, отримані в дисертації, дозволяють зрозуміти особливості локалізації і нелінійного транспорту енергії (заряду) у одновимірних молекулярних системах, пов'язані із врахуванням далекосяжності та ангармонізму міжмолекулярних взаємодій. У дисертації показано, що їх врахування приводить до появи якісно нових ефектів, як то мультистабільність та утворення зв'язаного стану солітонів, які потрібно приймати до уваги під час аналізу експериментальних спостережень.

Апробація роботи та публікації. Основні результати дисертації доповідались на Першій та Другій Всеукраїнських конференціях молодих вчених (Київ, квітень 1994 та травень 1995); на Міжнародній нараді з статистичної фізики і теорії конденсованих систем (Львів, вересень 1995); на міжнародній конференції "Copenhagen Conference on Complex Dynamics in Spatially Extended Systems" (Данія, Копенгаген, вересень 1995); на міжнародній конференції "Fluctuations, Nonlinearity and Disorder" (Греція, Геракліон, жовтень 1996) та на семінарах Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України.

По темі дисертації зроблено вісім робіт, три з яких опубліковані у вигляді статей в наукових журналах, одна видана препринтом, а чотири — у збірниках праць та тезах конференцій.

Особистий внесок автора. В роботах, що виконані із співавторами, особистий внесок полягав в обговоренні постановки задач та формулюванні висновків, а також виконанні основних аналітичних та чисельних розрахунків.

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота викладена на 137 сторінках і ілюстрована 32-ма малюнками; складається із вступу, трьох глав, висновку з оглядом основних результатів та переліку літератури з 122 найменувань.

Зміст роботи

У **Вступі** обгрунтована актуальність теми дисертації, проаналізована проблематика, якій вона присвячена, та визначене коло задач, що розглядаються у роботі.

В **першій главі**, "Зв'язаний стан давидовського та акустичного солітонів в ангармонічних молекулярних ланцюжках", вивчається характер взаємодії двох видів солітонів: акустичного і давидовського, які існують в ангармонічних молекулярних ланцюжках при наявності екситон–фононної взаємодії. Показано, що існує таке значення ангармонізму системи, при якому акустичний та давидовський солітони не взаємодіють. При слабшому ангармонізмові ці солітони відштовхують один одного, а при сильнішому — притягуються й можуть утворювати осцілюючий зв'язаний стан. У вступі до цієї глави робиться огляд сучасного стану проблеми, формулюється мета глави та стисло викладається її зміст. В другому розділі виводяться рівняння руху системи, виходячи з гамільтоніану

$$
\begin{aligned}
H \;=\; & J\sum_n \left[2|\psi_n|^2 - \psi_n^*(\psi_{n+1}+\psi_{n-1})\right] + \chi\sum_n |\psi_n|^2(\beta_{n+1}-\beta_{n-1}) \\
& +\frac{1}{2}\sum_n \left[M(\frac{d\beta_n}{dt})^2 + \omega(\beta_{n+1}-\beta_n)^2 - \frac{2}{3}\alpha\omega(\beta_{n+1}-\beta_n)^3\right] , \qquad (1)
\end{aligned}
$$

де $\psi_n(t)$ – амплітуда внутрішньомолекулярного збудження n-тої молекули, а $\beta_n(t)$ – зміщення n-тої молекули з положення рівноваги; J – енергія резонансної взаємодії; χ – параметр зв'язку внутрішньомолекулярних збуджень із зміщенням молекул; M – маса молекули і, нарешті, параметри ω та α характеризують значення повздовжньої гнучкості й кубічного ангармонізму ланцюжка, відповідно. Знаючи відстань між незбудженими молекулами, ℓ, можна знайти швидкість повздовжнього звуку, $v_0 = \ell\sqrt{\omega/M}$. Використовуючи континуальне наближення і переходячи до рухомої системи координат $\vartheta = n\ell - vt$, можна звести рівняння руху ланцюжка до слідуючої системи рівнянь на стаціонарні солітонні розв'язки

$$
\frac{d^2\varphi}{d\vartheta} - A\varphi + 2u\varphi = 0 \,, \qquad (2)
$$

$$
\frac{d^2u}{d\vartheta} - 4Bu + gu^2 - \varphi^2 = 0 \,, \qquad (3)
$$

де φ та u є безрозмірні змінні, пропорційні змінним ψ_n та $\beta_n - \beta_{n+1}$, відповідно. Значення параметру A при цьому визначається умовою нормування хвильової функції ϕ, а параметри B і g визначаються виразами

$$B = 3\left(\frac{v^2}{v_0^2} - 1\right) \quad , \quad g = \frac{12\alpha J}{\chi} \,, \tag{4}$$

На закінчення розділу згадуються деякі інші фізичні системи, які описуються системою (2)–(3), та показується, що ця система співпадає, після деяких перетворень, з загальновідомою системою Енона–Еліса, яка є інтегровною лише при трьох значеннях сталої ангармонізму g : $g = 1,\ 6,\ 16$. В третьому розділі знайдені усі можливі солітонні розв'язки системи (2)–(3) у найбільш цікавому з інтегровних випадків, при $g = 6$. Показано, що існує лише три вида стаціонарних солітонів:

Надзвукові акустичні солітони

$$\varphi = 0. \;, \qquad u = \frac{6}{g} B \,\mathrm{sech}^2 \sqrt{B}(\vartheta - \vartheta_0) \;, \tag{5}$$

які існують при будь-яких значеннях ангармонізму, g.

Солітони Давидова–Золотарюка

$$\begin{aligned} \varphi &= 2\sqrt{A(A-B)}\,\mathrm{sech}\sqrt{A}(\vartheta - \vartheta_0) \;, \\ u &= A\,\mathrm{sech}^2\sqrt{A}(\vartheta - \vartheta_0) \;, \end{aligned} \tag{6}$$

які існують лише при $g = 6$, але при будь-яких швидкостях.

Двогорбі солітони

$$\begin{aligned} \varphi &= 2\sqrt{A}(A-B)S^{-1}(\vartheta, R)\cosh\sqrt{B}(\vartheta - \vartheta_0 - R) \;, \\ u &= \frac{d^2}{d\vartheta^2}\ln S(\vartheta, R) \,, \end{aligned} \tag{7}$$

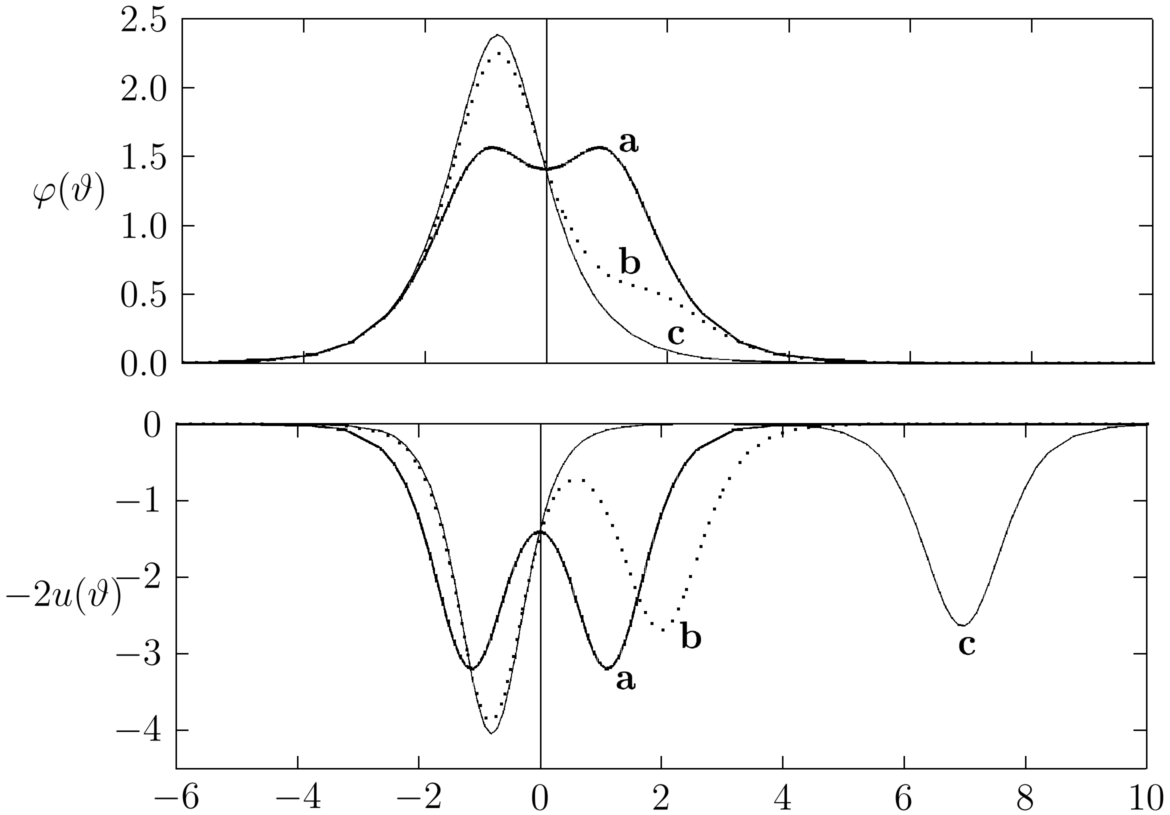
де R – постійна інтегрування, яка може приймати довільні значення, а

$$\begin{aligned} S(\vartheta, R) = \sqrt{A}\cosh(\sqrt{B}(\vartheta - \vartheta_0 - R))\cosh(\sqrt{A}(\vartheta - \vartheta_0)) \\ -\sqrt{B}\sinh(\sqrt{B}(\vartheta - \vartheta_0 - R))\sinh(\sqrt{A}(\vartheta - \vartheta_0) \;. \end{aligned} \tag{8}$$

Цей розв'язок існує лише при $g = 6$ та надзвукових швидкостях.

Перший тип солітонів відомий вже дуже давно, другий був знайдений А.С. Давидовим та А.В. Золотарюком у 1984 році, а третій — Ю.Б. Гайдідеєм, Дж.К. Ілбеком, П.Л. Хрістіансеном та В.З. Енольським у 1992 році.

Трохи пізніше й *чисельно* його знайшов також А.В. Савін у своїй докторській дисертації. У розділі показано, що двогорбий солітон є, насправді, двохсолітонним розв'язком і містить перші два типи солітонів як компоненти. Отже, в інтегровному випадку (тобто при цілком певному значенні сталої ангармонізму, $g = 6$) акустичний та давидовський солітони взаємодіють пружньо, вільно проходячи один крізь другий. Цей висновок підтверджується у четвертому розділі, де розраховані енергії усіх цих солітонних розв'язків: енергія двогорбого солітона виявляється в точності рівною сумі енергій акустичного та давидовського солітонів, *незалежно* від відстанні, R, між його компонентами. В п'ятому розділі вивчається неін-



Мал. 1. Двогорбі солітони при $v = 1.2v_0$ і $\vartheta_0 = 0$ для декількох значень R: **a)** $R = 0$, **b)** $R = 1$, **c)** $R = 6$.

тегровний випадок довільних значень ангармонізму, g. Використовуючи варіаційний підхід, ми показуємо, що в *неінтегровному* випадку енергія двогорбого солітона починає залежати від відстанні R таким чином, що при слабкому ангармонізмові ($g < 6$) давидовський і акустичний солітони відштовхуються і тому двогорбий солітон розпадається, а при сильному ($g > 6$) — притягуються й можуть утворювати осцілюючий зв'язаний стан з періодом коливань, експоненційно зростаючим із збільшенням амплітуди коливань. Якщо вважати, що вздовж ланцюжка переноситься заряджене збудження (надлишковий електрон або дірка) у вигляді електросолітона, то його зв'язаний стан з акустичним солітоном буде резонансно взаємодіяти із зовнішнім електричним змінним полем.

Нарешті, в шостому розділі проводиться чисельне моделювання вихідних *дискретних* рівнянь руху системи, яке повністю підтверджує усі пепередні висновки та доводить досить гарну динамічу стійкість солітонів при $g = 4 \div 10$.

Завершується глава сьомим, заключним розділом, в якому стисло відмічаються основні результати глави і обговорюється можливість їх прояву в реальних молекулярних ланцюжках.

В **другій главі**, "Нелокальне нелінійне рівняння Шредінгера", для опису систем з насичуючимся законом дисперсії запропоновано нове *нелокальне* нелінійне рівняння Шредінгера та досліджено властивості його солітонних розв'язків. Показано, що в протилежність звичайному НРШ, його нерухомі стаціонарні солітонні розв'язки існують лише коли рівень нелінійності системи не перевищує деяке критичне значення. Форма солітона змінюється від дзвоневидної (при малому рівні нелінійності) до загостреної (при колокритичному рівні), доходячи до загостреного солітона із сингулярною залежністю по координаті. При цьому загострені солітони є нестійкими й колапсують. Рухомий солітон випромінює енергію з довжиною хвилі, пропорційною швидкості солітона. Інтенсивність випромінювання експоненційно зменшується із зменшенням швидкості та (або) рівня нелінійності. В результаті солітон уповільнюється, проте час зменшення швидкості солітона до нуля є, по-всьому, нескінченно великим. У вступі до другої глави робиться огляд сучасного стану проблеми, формулюється мета глави та стисло викладається її зміст. Далі, у другому розділі, нагадуються головні властивості солітонних розв'язків звичайного НРШ з довільним ступенем нелінійності

$$i\psi_t + \psi_{xx} + |\,\psi\,|^p\,\psi = 0\ . \tag{9}$$

Рівень нелінійності системи визначається значенням норми

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x,t)|^2\ . \tag{10}$$

Мабудь, найголовнішими властивостями рівняння (9) є те, що його стаціонарні солітонні розв'язки існують при *довільному додатньому* значенні норми, N, і є стійкими при $p < 4$, *незалежно* від значення N. Обидві ці властивості втрачаються стаціонарними розв'язками нелокального НРШ

$$i\psi_t + \int\limits_{-\infty}^{\infty} J(x-y)\,(\psi(y,t)-\psi(x,t))dy + |\,\psi\,|^p\,\psi = 0\ , \qquad (11)$$

яке ми пропонуємо до розгляду у третьому розділі глави як узагальнення НРШ на випадок довільного закону дисперсії лінійних хвиль. В тому ж розділі починається детальне обговорення важливого часткового випадку закона дисперсії, — коли дисперсія насичується при великих значеннях хвильового вектора й описується експоненційним ядром нелокальності Кек–Бейкера

$$J(x-y) = \frac{\alpha^3}{2}\,\exp(-\alpha\,|x-y|)\ . \qquad (12)$$

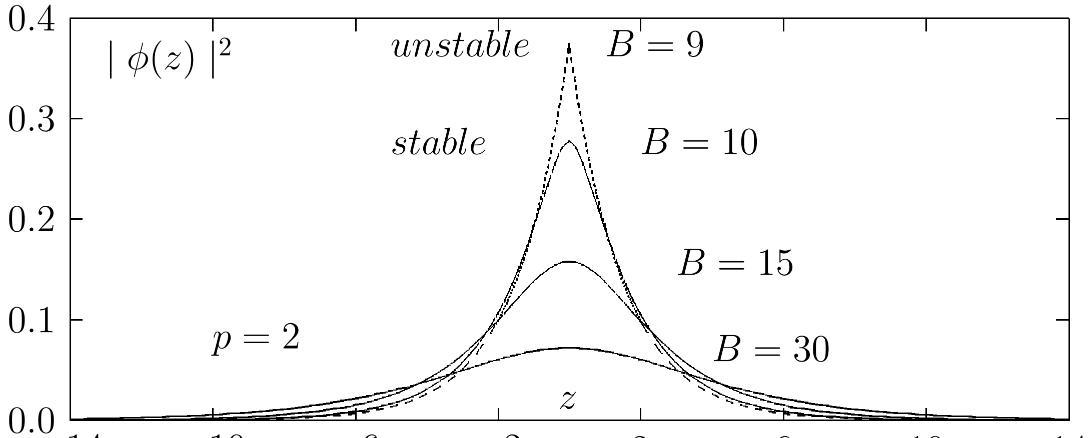
В четвертому розділі знаходиться нерухомий стаціонарний солітоноподібний розв'язок нелокального НРШ (11)–(12) вигляду

$$\psi(x,t) = \alpha^{2/p}\phi(z)\,e^{i\Lambda t}\ , \qquad (13)$$

де $z = \alpha x$. Показується, що його форма змінюється від дзвоневидної (при великих значеннях $B \equiv 1 + \alpha^2/\Lambda$) до загостреної (при $B \to (p+1)^2$), причому цей розв'язок обривається на гранично загостреному солітоні

$$\phi(z) = \left(\frac{p+1}{(p+1)^2-1}\right)^{1/p} \exp(-|z|/(p+1)) \qquad \text{при} \quad B = (p+1)^2\ , \qquad (14)$$

із сингулярною залежністю по координаті (див. мал. 2). При $B < (p+1)^2$ стаціонарних розв'язків не існує. П'ятий розділ розвиває варіаційний під-



Мал. 2. Нерухомий стаціонарний солітонний розв'язок НЛ–НРШ для $p = 2$

хід з метою дослідження стійкості знайденого раніше стаціонарного розв'язку. Виявляється, що на діаграмі "енергія–норма" він утворює дві гілки солітонів, які співіснують у деякому проміжку значень норми. Одна з цих гілок відповідає стійким дзвоневидним солітонам, а друга — нестійким загостреним, які з часом колапсують. При цьому існує критичне значення норми, при перевищенні якого не існує жодного стаціонарного стану і будь-яке достатньо сильно локалізоване початкове збудження колапсує. Справедливість цього висновку підтверджується прямими чисельними розрахунками. У шостому розділі вивчаються властивості рухомого солітона й доводиться, аналітично та чисельно, наявність непертурбативного випромінювання позаду солітона з довжиною хвилі, пропорційною швидкості руху солітона. Нарешті, у заключному сьомому розділі другої глави стисло нагадуються й обговорюються найважливіші її результати.

В **третій главі** дисертації, “Ефекти нелокальної дисперсійної взаємодії в дискретному нелінійному рівнянні Шредінгера”, продовжуються дослідження, розпочаті у другій главі, але тепер вивчається не континуальна, а дискретна система. Як було показано у другій главі, врахування дисперсійної нелокальності приводить до зникнення стаціонарних солітонів при великих значеннях норми, N, й до можливості колапса збудження при цьому. Але в *дискретній* системі не може бути колапса — замість нього відбувається перехід збудження в суттєво локалізований стан. Тому в дискретній системі можуть співіснувати вже не два, а три вида стаціонарних нерухомих солітонних станів: два стійких (слабко– та сильнолокалізований) та один нестійкий. При цьому можна виділити три інтервала значень норми: при малих її значеннях існує лише слабколокалізований стан, а при великих — лише сильнолокалізований. При проміжних значеннях норми співіснують всі три стаціонарні солітонні стани і стають можливими, таким чином, цікаві явища, пов’язані із взаємодією та взаємоперетворенням різних типів солітонів. Крім експоненційної Кек–Бейкерівської нелокальності, в главі розглянуто степеневу нелокальність, яка виникає за рахунок мультиполь–мультипольної взаємодії. Показано, що вже диполь–дипольна взаємодія є достатньо “нелокальною” для можливості співіснування слабко– та сильнолокалізованого солітонів. Особливість закона дисперсії, що відповідає системам із степеневою нелокальністю, приводить до можливості ситуації, коли слабколокалізований солітон втрачає стійкість і стійким стає *екситонний* стан. У вступі до третьої глави робиться огляд сучасного стану проблеми, формулюється мета глави та стисло викладається її зміст. При цьому відмічається важливість врахування просторової структури молекулярного ланцюжка, який описується нелінійним рівнянням Шредінгера, в разі врахування нелокального характера міжмолекулярної взаємодії. Показується, що у наближенні фрактальної моделі ланцюжка, дуже поширені системи з мультиполь–мультипольною дисперсійною взаюмодією між молекулами можна звести до ефективного лінійного у просторі ланцюжка із узагальненою степеневою нелокальністю вигляду

$$J_{n,m} = \frac{1}{\zeta(s)|n-m|^s} \ , \tag{15}$$

де $s = \ell/D$, з деяким цілим ℓ ($\ell = 3$ для диполь–дипольної взаємодії) та фрактальною розмірністю ланцюжка, D. Виходячи з експериментальних значень D, робиться висновок, що фізично цікавими є значення $s \gtrsim 1.8$. В другому розділі глави, виходячи з відповідного гамільтоніану системи, виводиться дискретне нелокальне нелінійне рівняння Шредінгера (ДНЛ–НРШ)

$$i\partial_t\psi_n + \sum_{m(m\neq n)} J_{n,m}(\psi_m - \psi_n) + |\psi_n|^2\psi_n = 0 \ . \tag{16}$$

Спочатку шукаються його стаціонарні нерухомі розв'язки

$$\psi_n = \phi_n \exp(i\Lambda t) \ , \tag{17}$$

для яких рівняння руху (16) перетворюється в нелінійну систему алгебраїчних рівнянь. В третьому розділі стисло описується метод, який використовувався для *чисельного* розв'язку цієї системи.

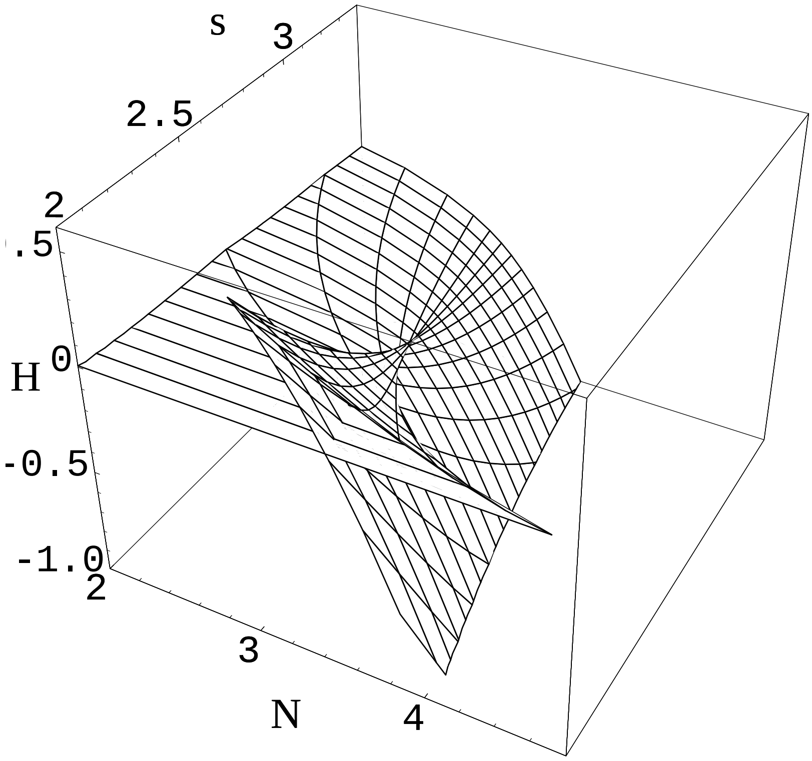
В четвертому розділі розглядається експоненційна Кек–Бейкерівська нелокальність

$$J_{n,m} = (e^{\alpha} - 1)e^{-\alpha|m-n|} \ , \tag{18}$$

для якої ДНЛ–НРШ в континуальному наближенні повністю співпадає з рівнянням, розглянутим у другій главі. Знайдений в ній аналітичний розв'язок порівнюється із знайденним чисельно розв'язком дискретної системи. Показано, що на відміну від континуального рівняння, внаслідок конкуренції між дискретністю та нелокальністю, властивості стаціонарних розв'язків в ДНЛ–НРШ суттєво залежать від значення параметра нелокальності α. А саме, якщо $\alpha > 1.67$, то властивості системи якісно не відрізняються від її властивостей у наближенні найближчих сусідів ($\alpha = \infty$), — кожному значенню норми

$$N = \sum_n |\psi_n|^2 \ , \tag{19}$$

відповідає лише один стаціонарний солітонний розв'язок. Якщо ж $\alpha < 1.67$, то виникає новий цікавий ефект мультистабільності солітонних розв'язків: існує інтервал значень норми, де співіснують три стаціонарних солітонних розв'язки, один з яких є нестійким. Тепер вже в системі немає гладкого переходу від слабко– до сильнолокалізованого солітона: навпаки, ці солітони стають різко відмінними й можуть співіснувати, так що можна говорити про існування в системі *двох різних типів стійких солітонів*. В проміжку



Мал. 3. Залежність енергії, H, стаціонарних солітонних розв'язків (17) системи (16), (15) від норми, N, та параметра нелокальності, s, знайденна варіаційним методом з використанням експоненційної пробної функції. Має місце біфуркація "ластівчин хвіст".

їх співіснування форма солітонів є досить близькою до форми загостреного солітона, $\psi_n \sim e^{-const\cdot|n|}$, знайденого у другій главі. Цей факт використовується у найбільшому п'ятому розділі глави, присвяченому вивченню властивостей системи при наявності степеневої мултиполь–мультипольної нелокальності (15). А саме, показується що використання варіаційного методу з експоненційною пробною хвильовою функцією дозволяє отримати результати (див. мал. 3), які якісно повністю співпадають з результатами чисельних розрахунків. Як і у випадку експоненційної нелокальності, існує критичне значення пераметру нелокальності, $s_{cr} = 3.03$, таке що при $s < s_{cr}$ у системі виникає явище мультистабільності стаціонарних солітонних розв'язків. Втім, особливістю степеневої нелокальності є те, що при $s < 3$ закон дисперсії, при малих значеннях хвильового вектора, змінюється з квадратичного на $\sim k^{s-1}$. Це приводить до одного важливого наслідку, доведеного аналітично точно, а саме: при $s \leq 2$ слабколокалізований солітон стає нестійким, а екситонний стан, навпаки, набуває стійкості. В термінах фрактальної моделі це означатиме, що слабколокалізовані солітони, стійкі в достатньо прямих ланцюжках, втрачають стійкість при переході ланцюжка до клубкоподібної конформації, що повинно супроводжуватись істотною зміною його транспортних властивостей. В останньому підрозділі п'ятого розділу використовується квазіконтинуальне наближення й показується, що у випадку $s = 2$ рівняння руху стає схожим на рівняння Бенджамена–Оно: як і останнє, воно записується в термінах перетворення Гільберта і має розв'язки у вигляді алгебраїчних солітонів. Завершується третя глава заключним шостим розділом, де обговорюються ефекти, до яких, за результатами глави, повинне приводити врахування дисперсійної нелокальності міжмолекулярних взаємодій у реальних молекулярних ланцюжках.

Наприкінці дисертації перераховуються основні результати дисертаційної роботи.

Основні результати роботи, що виносяться на захист

1. Досліджено характер взаємодії акустичного і давидовського солітонів в ангармонічних молекулярних ланцюжках й показано, що існує таке критичне значення ангармонізму, при якому взаємодія між ними фактично відсутня. При більш слабкому ангармонізмові солітони відштовхують один одного, а при більш сильному вони починають притягуватися і утворюють осцілюючий зв'язаний стан. Виходячи з оцінок параметрів реальних систем, робиться висновок, що такий зв'язаний стан може виникати в проблемі нелінійного переносу надлишкового заряда вздовж білка у вигляді *електросолітона*. При цьому, цей зв'язаний стан буде резонансно взаємодіяти із змінним електричним полем й приводити, таким чином, до експериментально спостережувальних ефектів.

2. Запропоновано одновимірне континуальне нелокальне нелінійне рівняння Шредінгера (НЛ–НРШ), що адекватно описує системи з насиченням закону дисперсії плоских хвиль. Детально вивчені його нерухомі стаціонарні солітонні розв'язки й показано, що ці розв'язки існують лише в обмеженому інтервалі значень норми хвильової функції, причому якщо значення норми близьке до максимального, то існують дві гілки стаціонарних розв'язків, одна з яких є нестійкою. При цьому форма солітона змінюється, при збільшенні значення норми, від дзвоневидної до загостреної. Якщо норма перевищує максимальне значення, то стаціонарного розв'язку не існує й будь-яке достатньо сильно локалізоване початкове збудження колапсує. Показано, що

внаслідок галілеєвої неінваріантності системи, в ній відсутні рухомі стаціонарні солітонні розв'язки, — при русі солітон буде непертурбативно випромінювати позаду себе хвіст з довжиною хвилі, пропорційною швидкості солітона.

3. Запропоновано одновимірне дискретне нелокальне нелінійне рівняння Шредінгера із степеневим характером дисперсійної нелокальності, яке дозволяє описати диполь-дипольне та інші види мультипольної резонансної міжмолекулярної взаємодії і врахувати при цьому, в рамках фрактальної моделі, просторову конфігурацію молекулярного ланцюжка. Показано, що при швидкому ослабленні інтенсивності нелокальної міжмолекулярної взаємодії з відстанню, перехід від слабколокалізованих солітонів до сильнолокалізованих відбувається плавно й, таким чином, властивості системи не відрізняються від її властивостей в наближенні найближчих сусідів. Якщо ж нелокальна взаємодія ослаблюється з відстанню достатньо повільно, то існує інтервал значень норми, де співіснують два вида солітонів (слабко- та сильнолокалізовані) і система є, таким чином, бістабільною. Існування явища бістабільності в дискретному НЛ–НРШ є результатом конкуренції між двома масштабами довжини системи: відстані між молекулами, з одного боку, й ефективного радіуса нелокальної взаємодії, з іншого.

4. Показано, що при зменшенні показника ступеня нелокальності, s, дискретного НЛ–НРШ із *степеневою* нелокальністю, слабколокалізований солітонний стан спочатку уширюється, а потім зникає (при $s = 2$), так що стійким стає екситонний стан. Враховуючи, що ефективне значення показника ступеня нелокальності змінюється при конформаційних переходах молекулярного ланцюжка, можна очікувати на різку зміну основного стану ланцюжка і, таким чином, його транспортних властивостей, під час цих переходів.

5. Розглянуто квазі-континуальний варіант дискретного НЛ–НРШ із *степеневою* нелокальністю і показано, що це рівняння переходить в звичайне НРШ при великих показниках ступеня нелокальності, $s > 3$, й редукується до рівняння "Гільберт–НРШ", близького аналога рівняння Бенджамена–Оно, при $s = 2$. Показано, що в одному частковому випадку Гільберт–НРШ має розв'язок у вигляді алгебраїчного солітона.

Матеріали дисертації опубліковано в таких роботах:

1. Yu.B. Gaididei, P.L. Christiansen and S.F. Mingaleev, *Bound States of Envelope and Boussinesq Solitons in Anharmonic Lattices*, Physica Scripta **51** (1995) 289–299.

2. Yu.B. Gaididei, S.F. Mingaleev, P.L. Christiansen, and K.Ø. Rasmussen, *Effect of nonlocal dispersion on self-interacting excitations*, Phys. Lett. A **222** (1996) 152-156.

3. Yu.B. Gaididei, S.F. Mingaleev, P.L. Christiansen, I.I. Yakimenko,M. Johansson and K.Ø. Rasmussen, *The Nonlinear Schrödinger systems: Collapse, Nonlinear damping, Noise, Impurities and Nonlocal dispersion*, Physica Scripta **T67** (1996) 151–159.

4. Yu.B. Gaididei, S.F. Mingaleev, P.L. Christiansen, and K.Ø. Rasmussen, *Effects of Nonlocal Dispersion on Nonlinear Schrödinger Equation*, Kiev (1996) 1–13 (Preprint ITP-96-11E).

5. С.Ф. Мінгалєєв, *Зв'язаний стан Давидівського та Акустичного солітонів в сильноангармонічних ланцюжках*, Праці Всеукраїнської конференції молодих вчених (фізика), Київський університет, (квітень 1994) 17–24.

6. Yu.B. Gaididei and S.F. Mingaleev, *Non-local nonlinear Schrödinger equation*, International workshop on statistical physics and condensed matter theory, Lviv, Ukraine (11–14 September, 1995) p. 80.

7. S.F. Mingaleev, *Non-local Nonlinear Schrödinger Equation*; Yu.B. Gaididei, S.F. Mingaleev, P.L. Christiansen and K.Ø. Rassmussen, *Effect of Non-local Interaction on Soliton Dynamics in Spatially Extended Systems*; Copenhagen Conference on Complex Dynamics in Spatially Extended Systems, Niels Bohr Institute, Denmark (27–30 September, 1995) pp. P33, O19.

8. Yu.B. Gaididei, S.F. Mingaleev, P.L. Christiansen and K.Ø. Rassmussen, *Nonlocal Dispersive Interactions in Discrete Nonlinear Schrödinger Equation*, International Conference "Fluctuations, Nonlinaerity and Disorder", Hotel Santa Marina, Heraclion, Crete, Greece (30 September – 4 October, 1996) p.47.

Mingaleev S.F. *Effects of Nonlocality and Anharmonicity on Nonlinear Transport of Energy and Charge.* (The candidate of sciences thesis in physics and mathematics, in speciality 01.04.02 — theoretical physics, Institute for Theoretical Physics NAS of Ukraine, Kiev, 1997).

Eight scientific works are defended, which contain a theoretical study of the interaction between Davydov and Boussinesq solitons in anharmonic molecular lattices, and the effects of nonlocal dispersive interactions on soliton dynamics in continuum and discrete Nonlinear Schrödinger Equations. It is determined that Davydov and Boussinesq solitons can create a bound state. It is shown that in *Nonlocal* Nonlinear Schrödinger equation can coexist several types of solitons with different localization and a collapse of wave function can take place.

Мингалеев С.Ф. *Эффекты дальнодействия и ангармонизма в нелинейном транспорте энергии и заряда.* (Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 — теоретическая физика, Институт теоретической физики НАН Украины, Киев, 1997). Защищается *восемь* научных работ, которые содержат теоретическое исследование характера взаимодействия давыдовских и акустических солитонов в ангармонических молекулярных цепочках и свойств солитонных решений континуального и дискретного нелинейных уравнений Шрёдингера при наличии дисперсионной нелокальности. Установлено, что давыдовский и акустический солитон могут образовывать связанное состояние. Показано, что в *нелокальном* уравнении Шредингера могут сосуществовать несколько типов солитонов с различной степенью локализации и может происходить коллапс волновой функции.

Ключові слова: ангармонічий молекулярний ланцюжок, дисперсійна нелокальність, колапс, мультистабільність, нелінійне рівняння Шредінгера, одновимірність, система Енона–Еліса, солітон.

Мінгалєєв Сергій Федорович

Ефекти далекосяжності і ангармонізму в нелінійному транспорті енергії та заряду. (Автореферат дисертації на здобуття вченого ступеня кандидата фізико-математичних наук.)

Зам.-	Формат $60 \times 90/16$	Обл.-вид.арк.-
Підписано до друку	р.	Тираж 100 прим.

Поліграфічна дільниця ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України.