

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК УКРАИНЫ  
ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ ИМ. Н.Н. БОГОЛЮБОВА

На правах рукописи

*Мингалеев  
Сергей Федорович*

**ЭФФЕКТЫ ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ И  
АНГАРМОНИЗМА В НЕЛИНЕЙНОМ ТРАНСПОРТЕ  
ЭНЕРГИИ И ЗАРЯДА**

01.04.02 — теоретическая физика

**Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук**

Научный руководитель —  
доктор физико-математических наук, профессор  
**Гайдидей Юрий Борисович**

**Киев — 1997**

# Содержание

<b>Введение</b>	<b>4</b>
• О модели Давыдова . . . . .	7
• О содержании диссертации . . . . .	13
• О публикациях . . . . .	16
<b>1 Связанное состояние солитонов</b>	<b>18</b>
1.1 Введение . . . . .	18
1.2 Уравнения движения ангармонической молекулярной цепочки	21
1.3 Солитонные решения в <i>интегрируемом</i> случае . . . . .	29
1.4 Энергия солитонных решений . . . . .	36
1.5 Вариационный подход к неинтегрируемому случаю . . . . .	41
1.6 Мир численных расчетов . . . . .	45
1.7 Заключение . . . . .	55
<b>2 Нелокальное нелинейное уравнение Шрёдингера</b>	<b>58</b>
2.1 Введение . . . . .	58
2.2 Напоминание о свойствах обычного НУШ . . . . .	62
2.3 Уравнение движения . . . . .	63
2.4 Неподвижные стационарные солитонные решения . . . . .	66
2.5 Устойчивость неподвижного солитона . . . . .	70
2.6 Излучение движущегося солитона . . . . .	81
2.7 Заключение . . . . .	84

<b>3 Эффекты нелокальности в дискретном НУП</b>	<b>86</b>
3.1 Введение . . . . .	86
3.2 Дискретные уравнения движения . . . . .	91
3.3 Метод численного решения системы . . . . .	93
3.4 Экспоненциальная нелокальность . . . . .	94
3.5 Степенная нелокальность . . . . .	100
3.5.1 Экспоненциальная пробная функция . . . . .	102
3.5.2 Устойчивость экситонного состояния . . . . .	112
3.5.3 Квази–континуальное приближение . . . . .	115
3.6 Заключение . . . . .	119
<b>Основные результаты</b>	<b>121</b>
<b>Благодарность</b>	<b>124</b>
<b>Литература</b>	<b>125</b>

## Введение

*Большой, важный и очень часто обсуждаемый вопрос заключается в следующем: как физика и химия смогут объяснить те явления в пространстве и времени, которые происходят внутри живого организма?*

*Эрвин Шрёдингер, “Что такое жизнь? С точки зрения физика”.*

*Каждый из нас знает, как много для всех нас важного, ценного и дорогого связано с правильным и точным ответом, разрешением этих вопросов, если бы мы смогли на них сейчас дать точные ответы. Ибо нет вопросов более важных для нас, чем вопросы о загадке жизни, той вечной загадке, которая тысячелетиями стоит перед человечеством и которую оно стремится разрешать всеми духовными сторонами своего личного и своего коллективного творчества. А всякое разрешение загадки жизни предварительно связано с ответом на эти более узкие, но по существу огромной глубины и важности вопросы, которые сегодня стоят перед нами.*

*Владимир Вернадский, “Начало и вечность жизни”.*

С точки зрения физики, живые существа являются неравновесными открытыми системами, — то есть, их структура определяется и поддерживается непрерывным потоком энергии и вещества, проносимых сквозь них окружающей средой. По существу, живые организмы являются *трансформаторами энергии*, не позволяющими ей сразу же, бесследно, рассеяться по Вселенной, обратившись в тёплое равновесное ничто, и та вечная загадка жизни, о которой говорит Вернадский, заключается, по большей части, именно в понимании конкретных механизмов происходящей трансформации, с одной стороны, и в проблеме зарождения и эволюции этих механизмов, с другой стороны. Поиск ответа на второй вопрос пока что прежде времен и требует предварительного ответа на первый: как именно энергия солнечного света преобразуется в химическую энергию молекулярных “аккумуляторов” и используется впоследствии для синтеза макромолекул и

поддержания неравновесных условий существования живого организма.

К середине семидесятых годов было выяснено, что существуют две основные “разменные монеты” в энергетике живой клетки: молекулы АТФ и мембранный протонный потенциал. Стало ясно также, что весьма часто места освобождения химической энергии и нового её связывания разделены огромными, с молекулярной точки зрения, расстояниями и что перенос энергии между ними осуществляется благодаря некоторым внутримолекулярным возбуждениям. Это должны были быть, принимая во внимание необыкновенно высокую эффективность процесса переноса, довольно необычные, с точки зрения квантовой физики того времени, возбуждения. Необычные настолько, что возникало даже представление о кризисе в биоэнергетике.

Однако, почти одновременно с развитием биоэнергетики, начиная с шестидесятых годов, шло исследование нелинейных волновых процессов, приведшее к открытию, а вернее — к осознанию важности и универсальности, солитонных решений. Солитоны, *solitary waves*, уединённые волны, — они вдруг были обнаружены и оказались жизненно важны во многих процессах, связанных с волновыми и транспортными явлениями. Неизбежно, это новое веяние должно было охватить и биоэнергетику. Перенос энергии *локализованным* возбуждением? Такая идея не могла не возникнуть... И она была рождена, — в нашем институте, в середине семидесятых, Александром Сергеевичем Давыдовым.

Предположение о *солитонном* механизме транспорта энергии вдоль биологических макромолекул позволило объяснить многие непонятные ранее свойства этого явления. К сожалению, из-за трудностей экспериментального характера пока что ещё нет прямых экспериментальных доказательств реализации именно этого механизма в живых организмах. Однако

само существование и важная роль солитонных возбуждений в макромолекулярных структурах типа плёнок Ленгмюра–Блоджетт, в полимерах и в молекулах ДНК уже не вызывает сомнений и активно исследуется. В данной диссертационной работе делается попытка выйти за пределы некоторых, широко использовавшихся в ранних исследованиях, приближений в сторону более адекватного описания транспортных явлений в одномерных молекулярных цепочках.

При этом, всё же, нашим единственным стремлением было стремление приблизиться немножко к решению загадки жизни... Но хотя в результате наших исследований и были найдены новые и, по всей видимости, важные по своим следствиям, эффекты, основная цель всё так же далека... И вспоминается замечание Гёте о том, что

*Сущность дилетантизма в том и заключается, что дилетант не понимает трудностей того, за что он берётся, и всегда намеревается предпринять то, на что у него недостанет сил...*

И всё же, всё же... — какой смысл жить *иначе*? — “ибо нет вопросов более важных для нас, чем вопросы о загадке жизни” ...

## О модели Давыдова

*На земле есть много хороших изобретений, из них одни полезны, другие приятны; ради них стоит любить землю.*

*И многие изобретения настолько хороши, что являются, как грудь женщины, — одновременно полезными и приятными.*

*Фридрих Ницше, “Так говорил Заратустра”.*

Теоретическое исследование явлений переноса энергии и заряда в сложных биологических и полимерных молекулярных системах, часто находящихся в водном окружении, неизбежно связано со значительными упрощениями и моделированием, отражающим главные свойства этих явлений. При этом, приступая к моделированию каждой конкретной системы, необходимо учитывать её специфические особенности, заключающиеся в том, что её периодичность и низкоразмерность каждый раз на свой манер искажаются приставкой *квази*. Так, например,  $\alpha$ -спиральные белки содержат три канала связанных водородными связями пептидных групп и каналы эти нельзя считать независимыми. К тому же, обычно в состав белка входят различные аминокислоты, имеющие неодинаковые массы и другие параметры системы, что нарушает её периодичность.

Тем не менее, как первый шаг в исследовании, часто бывает полезна следующая простая, строго периодическая и одномерная, модель [1, 2]. Предположим, что молекулы расположены вдоль одной линии на равных расстояниях  $\ell$  друг от друга и что внутренние возбуждения (электронные или колебательные) каждой изолированной молекулы характеризуются энергией  $\mathcal{E}_0$  и дипольным электрическим моментом  $\mathbf{d}$ , направленным под углом  $\vartheta$  к оси цепочки. Будем считать, что цепочка молекул довольно мягкая, так что при переходе цепочки в возбужденное состояние меняются равновесные расстояния между молекулами и могут возбуждаться продольные колебания молекул (однако не могут — поперечные). Предпо-

ложим также, что цепочка состоит из достаточно большого числа молекул, так что краевыми эффектами можно пренебречь.

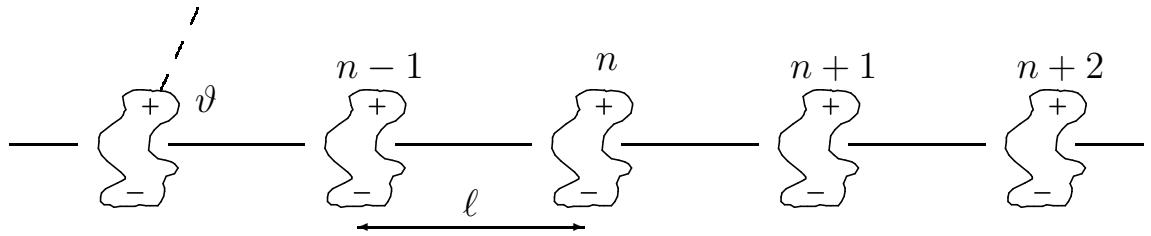


Рис. 0.1. Простая модель молекулярной цепочки.

Равновесные расстояния между молекулами в основном состоянии определяются *вандерваальсовым* взаимодействием, описываемым гамильтонианом *фононной подсистемы*

$$\hat{H}_{ph} = \sum_n \left[ \frac{\hat{p}_n^2}{2M} + \hat{V}(\hat{u}_{n+1} - \hat{u}_n) \right], \quad (0.1)$$

где  $M$  — масса молекулы;  $\hat{p}_n$  — оператор импульса  $n$ -той молекулы, канонически сопряженный оператору  $\hat{u}_n$  смещения её из положения равновесия, а  $\hat{V}$  — оператор потенциальной энергии межмолекулярного взаимодействия, допускающий, в приближении малых смещений, разложение в ряд Тейлора

$$\hat{V}(\hat{u}_{n+1} - \hat{u}_n) = \frac{1}{2}\omega(\hat{u}_{n+1} - \hat{u}_n)^2 - \frac{1}{3}\alpha\omega(\hat{u}_{n+1} - \hat{u}_n)^3 + \dots \quad (0.2)$$

где  $\omega$  и  $\alpha$  — коэффициенты продольной упругости и кубического ангармонизма цепочки, соответственно.

При переходе молекулы под номером  $n$  в возбужденное состояние, проявляются два новых взаимодействия. Одно из них, — *резонансное*, — приводит к перескоку возбуждения с молекулой  $n$  на молекулу  $m$ . Оно затрагивает только *экстонную подсистему* и описывается гамильтонианом

$$\hat{H}_{ex} = \sum_n \hat{B}_n^+ \left[ \mathcal{E} \hat{B}_n - \sum_m J_{n-m} \hat{B}_m \right], \quad (0.3)$$

где  $\hat{B}_n^+$  и  $\hat{B}_n$  – операторы рождения и уничтожения возбуждения на молекуле  $n$ , а  $J_{n-m}$  – энергия резонансного взаимодействия. В случае наиболее распространенного диполь–дипольного взаимодействия, эта энергия определяется равенством

$$J_{n-m} = \frac{\mathbf{d}^2}{\ell^3} (3 \cos^2 \vartheta - 1) \cdot |n - m|^{-3}. \quad (0.4)$$

Заметим, что используемое в (0.3) значение энергии возбуждения отдельной молекулы *недеформированной* цепочки  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 - \mathcal{D}$  отличается от значения энергии возбуждения *изолированной* молекулы  $\mathcal{E}_0$  из–за изменения на величину  $-\mathcal{D}$  энергии взаимодействия между молекулами при переходе одной из них в возбужденное состояние. Кроме того, из–за этого же изменения энергии возникает тенденция к деформации цепочки в области, охваченной возбуждением. В этом проявляется второе, *экситон–фононное*, взаимодействие, которое смешивает две подсистемы цепочки. В первом приближении гамильтониан этого взаимодействия можно записать в виде

$$\hat{H}_{int} = \chi \sum_n (\hat{u}_{n+1} - \hat{u}_{n-1}) \hat{B}_n^+ \hat{B}_n, \quad (0.5)$$

где параметр

$$\chi = - \left( \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial u_n} \right)_{u_n=0}, \quad (0.6)$$

характеризует связь экситонов с фононами.

Итак, мы приходим к выводу, что коллективные возбуждения цепочки описываются гамильтонианом, содержащим три слагаемых

$$\hat{H} = \hat{H}_{ex} + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_{int}. \quad (0.7)$$

Необходимо отметить, что хотя мы пришли к (0.7), исходя из представлений о переносе вдоль цепочки *внутримолекулярного возбуждения*, точно такой же гамильтониан возникает и в задаче о транспорте *избыточного*

электрона, полученного цепочкой от некоторой донорной молекулярной группы [3]. Поэтому, в рамках данной простой модели молекулярной цепочки и до тех пор, пока мы не рассматриваем процессы рождения и уничтожения возбуждения, его взаимодействие с электромагнитными волнами и т. п., математическое описание этих двух явлений полностью совпадает. Так что в дальнейшем, говоря о возбуждении молекулы, мы будем иметь в виду либо её внутреннее, электронное или колебательное, возбуждение, либо её связанное состояние с избыточным электроном.

Нам остается теперь отыскать все возможные низкоэнергетические коллективные возбуждения цепочки, описываемой гамильтонианом (0.7). К сожалению, эта задача, как практически и все многочастичные квантовые проблемы, не решается аналитически точно и требует использования различных приближенных методов. Интересно, что фактически вся квантовая физика последних десятилетий посвящена их разработке и изобретение *действительно новых* методов, — событие весьма не частое. Пожалуй, все существующие методы удобно разбить на два класса, — методы *теории возмущений* и *непертурбативные* методы. Первые уже хорошо разработаны и применяются, когда имеется точно решаемая система, слегка “подпорченная” какими-либо слабыми возмущениями. В нашем случае ими будут экситон–фононное взаимодействие и ангармонизм фононной подсистемы, если только параметры  $\chi$  и  $\alpha$  малы. Огромным недостатком таких методов является то, что они неспособны описать, ни в каком порядке теории возмущений, целый ряд так называемых “непертурбативных” явлений. А именно к ним относятся явления локализации внутримолекулярного возбуждения и избыточного заряда в цепочке, которые рассматриваются в данной диссертационной работе. Интересно отметить, что, по-видимому, первым непертурбативным явлением, изученным в теории твердого тела,

было явление автолокализации электронов в ионных кристаллах, приводящее к возникновению *поляронов* [4, 5].

Воспользуемся давыдовской пробной волновой функцией [1, 2, 6], в которой экситонные и фононные состояния входят в виде произведения и потому не перемешиваются

$$|\phi(t)\rangle = |\Psi\rangle|\Phi\rangle , \quad (0.8)$$

где

$$|\Psi\rangle = \sum_n \psi_n(t) \hat{B}_n^+ |0\rangle_{ex} , \quad (0.9)$$

описывает распределение одного кванта внутримолекулярного возбуждения вдоль цепочки, а  $|\Phi\rangle$  является когерентным фононным состоянием [7, 8]

$$|\Phi\rangle = \exp(\hat{\sigma}(t))|0\rangle_{ph} . \quad (0.10)$$

Здесь

$$\hat{\sigma}(t) \equiv -\frac{i}{\hbar} \sum_n [\beta_n(t) \hat{p}_n - \pi_n(t) \hat{u}_n] , \quad (0.11)$$

так что сразу можно видеть, что функции  $\beta_n(t)$  и  $\pi_n(t)$  характеризуют средние значения смещений и импульсов молекул в когерентном состоянии

$$\langle \Phi | \hat{u}_n | \Phi \rangle = \beta_n(t) , \quad \langle \Phi | \hat{p}_n | \Phi \rangle = \pi_n(t) . \quad (0.12)$$

В результате мы получаем эффективный *квазиклассический* гамильтониан цепочки, являющийся функционалом комплексных функций  $\psi_n(t)$  и вещественных функций  $\beta_n(t)$  и  $\pi_n(t)$

$$\mathcal{H}(\{\psi_n, \psi_n^*, \beta_n, \pi_n\}) \equiv \langle \phi(t) | \hat{H} | \phi(t) \rangle = \sum_n \psi_n^* \left\{ [\mathcal{E} + \mathcal{W} + \chi(\beta_{n+1} - \beta_{n-1})] \psi_n - \sum_{m \neq n} J_{n-m} \psi_m \right\} , \quad (0.13)$$

где  $\mathcal{W}$  – энергия деформации цепочки,

$$\mathcal{W} = \sum_n \left[ \frac{\pi_n^2}{2M} + \mathcal{V}(\beta_{n+1} - \beta_n) \right] , \quad (0.14)$$

и  $\mathcal{V}$  – потенциальная энергия межмолекулярного взаимодействия (0.2), принимающая теперь вид

$$\mathcal{V}(\beta_{n+1} - \beta_n) = \frac{1}{2}\omega(\beta_{n+1} - \beta_n)^2 - \frac{1}{3}\alpha\omega(\beta_{n+1} - \beta_n)^3 + \dots \quad (0.15)$$

Уравнения движения, к которым приводит гамильтониан (0.13), имеют вид

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi_n(t) = \mathcal{E} \psi_n - \sum_{m \neq n} J_{n-m} \psi_m + \chi(\beta_{n+1} - \beta_{n-1}) \psi_n, \quad (0.16)$$

$$\begin{aligned} M \frac{d^2}{dt^2} \beta_n(t) = & \omega(\beta_{n+1} + \beta_{n-1} - 2\beta_n)(1 - \alpha(\beta_{n+1} - \beta_{n-1})) \\ & + \chi(|\psi_{n+1}|^2 - |\psi_{n-1}|^2). \end{aligned} \quad (0.17)$$

В адиабатическом же ( $\ddot{\beta}_n \approx 0$ ) и гармоническом ( $\alpha = 0$ ) приближениях оно переходит в уравнение, обобщающее дискретное нелинейное уравнение Шрёдингера

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi_n(t) - \mathcal{E} \psi_n + \sum_{m \neq n} J_{n-m} \psi_m + \frac{\chi^2}{\omega} |\psi_n|^2 \psi_n = 0. \quad (0.18)$$

По существу, в диссертации будут изучаться солитонные решения различных вариантов именно этих уравнений. Поэтому необходимо, хотя бы кратко, коснуться вопроса их точности, а точнее, — точности давыдовской пробной волновой функции (0.8). Уже сравнение с теорией возмущения позволяет видеть, что эта пробная функция весьма плохо работает в случае слабой экситон–фононной связи. Она приводит к понижению энергии, связанному с наличием экситон–фононной связи, пропорциональному  $\chi^4$ , в то время как в действительности оно пропорционально лишь  $\chi^2$ . Однако в нашей работе интересные новые эффекты имеют место как раз в противоположном случае сильной связи. В этом же случае, давыдовская модель является достаточно точной [10] и дальнейший рост точности достигается лишь неоправданно чрезмерным усложнением модели.

## О содержании диссертации

— Неважно. Я там тоже никогда не был, но я прочёл лекцию, и, судя по отзывам, это была очень полезная лекция. Дело ведь не в том, был ты в лесу или не был, дело в том, чтобы содрать с фактов шелуху мистики и суеверий, обнажить субстанцию, сорвав с неё одеяние, напяленное обычателями и утилитаристами...

*Аркадий и Борис Стругацкие, “Улитка на склоне”.*

Итак, в предыдущем разделе исходная существенно нелинейная квантовая задача была сведена к квазиклассической. Это позволяет нам теперь намного эффективнее бороться с нелинейностью задачи, опираясь на быстро развивающийся в последние десятилетия математический аппарат нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных. Всматриваясь в уравнения (0.16)–(0.18) более внимательно, можно видеть, что они принадлежат к классу нелинейных дисперсионных волновых уравнений, уравнений, не перестающих нас удивлять и радовать своими *солитонными* решениями. И, если быть более правдивым, то необходимо признать, что транспорт энергии — всего лишь тема диссертации, настоящее же её содержание составляют именно солитоны.

В первых работах Давыдова и его сотрудников и коллег [2] исследовались приближённые варианты уравнений (0.16)–(0.18). Именно, предполагалось, что возбуждение может перескакивать лишь на ближайшие молекулы и что отсутствует ангармонизм фононной подсистемы. В этом приближении было показано существование солитонных возбуждений, которые теперь принято называть давыдовскими солитонами. Такие солитоны могли перемещаться только со скоростью, меньшей скорости длинноволнового продольного звука, причём их энергия неограниченно возрастала при приближении скорости к звуковой.

Позднее, Давыдовым и Золотарюком было показано [11, 12], что этот

нефизический барьер устраняется при учёте ангармонизма цепочки. Интересно, что при этом в системе появляется и совершенно иной тип локализованных возбуждений, — сверхзвуковые акустические солитоны, открытие которых принято связывать с именем Тоды [13, 14]. В связи с этим возникает новая интересная проблема: взаимодействие акустических солитонов с давыдовскими. Решению этой проблемы посвящена первая глава диссертации, в которой показано, что характер взаимодействия вышеупомянутых солитонов существенно зависит от величины ангармонизма цепочки. Как выяснилось, существует критическое значение ангармонизма, при котором взаимодействие между солитонами фактически отсутствует. При более слабом ангармонизме они отталкивают друг друга, а при более сильном ангармонизме солитоны начинают притягиваться и образуют бризероподобное связанное состояние. Исходя из оценок параметров реальных систем, мы делаем вывод, что такое связанное состояние может возникать в задаче нелинейного транспорта заряда в виде *электросолитона*. Оно должно при этом резонансно взаимодействовать с переменным электрическим полем и приводить, таким образом, к легко экспериментально наблюдаемым эффектам.

Во второй главе мы рассматриваем одномерное нелинейное уравнение Шрёдингера, обобщённое на случай насыщающегося при больших волновых векторах закона дисперсии линейных волн. Это уравнение, являющееся континуальным пределом уравнения (0.18), позволяет, с одной стороны, выйти за пределы приближения ближайших соседей в модели Давыдова и может, с другой стороны, описывать и иные классы задач, приводящие к нелинейному уравнению Шрёдингера с насыщающимся законом дисперсии. В главе показано, что солитонные решения этого уравнения существуют только в конечном интервале значений множителя при нелинейном сла-

гаемом, причём вблизи верхней границы интервала имеются две ветви стационарных солитонных решений, одна из которых является неустойчивой. Интересно, что форма солитона изменяется, при увеличении нелинейности, от колоколообразной до заострённой. Если нелинейность превышает максимально допустимую, то стационарного решения просто не существует и любой достаточно сильно локализованный изначально волновой пакет коллапсирует за конечное время. Наконец, показано, что вследствие отсутствия галилеевской инвариантности системы, в ней отсутствуют стационарные движущиеся солитоны, — движущийся солитон будет излучать позади себя хвост с длиной волны, пропорциональной скорости солитона.

Ясно, однако, что в *дискретной* молекулярной системе коллапс невозможен и вместо него будет происходить переход возбуждения в существенно локализованное состояние, — грубо говоря, возбуждение сядет на одну молекулу. Поэтому, в отличие от приближения ближайших соседей, при учёте нелокального характера межмолекулярного взаимодействия мы уже не можем так же плодотворно ограничиваться изучением решений уравнения (0.18) в его континуальном пределе. Дискретность системы начинает играть намного более яркую роль, ибо теперь она уже *конкурирует* с нелокальностью, а ведь любое соперничество действительно разных характеров всегда проходит подчёркнуто драматически. Действительно, кроме расстояния между молекулами появляется новый масштаб длины, — эффективный радиус нелокальности межмолекулярного взаимодействия. Изучению особенностей дискретного нелокального нелинейного уравнения Шрёдингера посвящена третья глава работы. В ней показано, что благодаря конкуренции дискретности и нелокальности в системе существуют два резко отличные друг от друга типа солитонов, — слабо и существенно локализованные, и существует интервал параметров системы, где сосуще-

ствуют оба типа. Тем самым намного увеличивается разнообразие свойств системы, которое должно приводить к новым интересным, ещё не исследованным нами, эффектам, связанным с взаимодействием и взаимопрервращением различных типов солитонов. Показано также, что если нелокальное взаимодействие достаточно медленно ослабляется с расстоянием между молекулами, то решения в виде давыдовского солитона в цепочке не существует, — устойчивым же становится экситонное возбуждение. При учёте реальной конформации цепочки, это явление должно приводить к резкому изменению её транспортных свойств при конформационных переходах “клубок—глобула”, ярким примером которого является денатурация белка.

Из-за своей относительной независимости друг от друга, каждая из этих глав сопровождается своими собственными вводным и заключительным разделами.

## О публикациях

По теме диссертации выполнено шесть работ [15, 16, 17, 18, 20, 21], три из которых опубликованы (а одна принята к публикации) в виде статей в научных журналах, одна опубликована в сборнике трудов конференции и ещё одна издана препринтом. Основные результаты диссертации докладывались на Первой и Второй [21] Всеукраинских конференциях молодых ученых (Киев, апрель 1994 и май 1995 г.), на Международном совещании по статистической физике и теории конденсированных систем (Львов, сентябрь 1995 г.) [22], на “Copenhagen Conference on Complex Dynamics in Spatially Extended Systems” (Дания, Копенгаген, сентябрь 1995 г.) [23], на международной конференции “Fluctuations, Nonlinearity and Disorder” (Греция, Гераклион, октябрь 1996 г.) [19] и на семинарах отделов теории мно-

гочастичных систем и теории нелинейных явлений в конденсированных средах ИТФ НАН Украины.

## Глава 1.

# Связанное состояние Давыдовского и Акустического солитонов в ангармонических молекулярных цепочках

Союз их кровный, не случайный,  
И только в роковые дни  
Своей неразрешимой тайной  
Обворожают нас они.

*Фёдор Тютчев, “Близнецы”.*

### 1.1. Введение

До недавнего времени в основе большинства исследований, связанных с изучением нелинейного транспорта энергии или заряда в молекулярных цепочках, лежало гармоническое приближение. Предполагалось, что нелинейность задачи возникает только за счёт экситон–фононного взаимодействия, но не за счёт нелинейности самой фононной подсистемы [9, 10]. В своё время это приближение было достаточно хорошим, но времена меняются и сейчас значительный интерес вызывают материалы с довольно сильным экситон–фононным взаимодействием, для которых вызываемая этим взаимодействием деформация цепочки не может считаться малой. Свойства *таких* систем не могут быть поняты без учёта фононного ангармонизма. Так, например, имеются веские основания [29] считать, что име-

ется корреляция между структурной неустойчивостью ВТСП, сильной ангармоничностью колебаний кислорода в них и фазовым переходом в сверхпроводящее состояние. Ангармонические взаимодействия играют важную роль и в динамике ДНК [30, 31, 32], причём вибрационная энергия в них может переносится не только акустическими солитонами, но и более сложными солитонными образованиями. Так, в частности, при моделировании ДНК цепочкой Тоды с поперечными степенями свободы, была продемонстрирована важность нелинейного связывания между продольными и поперечными движениями [33, 34], что делает возбуждения цепочки двухкомпонентными и в этом отношении близкими к рассматриваемым нами.

Ангармонизм межмолекулярных взаимодействий играет важную роль также в сверхзвуковом солитонном транспорте. Хорошо известно, что в гармоническом приближении скорость давыдовских солитонов не может превышать скорость длинноволнового звука, поскольку при приближении к последней смещения молекул становятся бесконечно велики. Чтобы преодолеть этот *нефизический* барьер скорости, необходимо принять во внимание ангармоничность цепочки [11, 12]. Однако при этом в системе появляется ещё и второй тип солитонного возбуждения – сверхзвуковой акустический солитон. Поэтому возникает интересный вопрос относительно характера взаимодействия давыдовского солитона с акустическим. Это становится тем более актуальным, что имеются недавние попытки [35, 36] интерпретировать эксперименты переноса энергии в агрегатах Ленгмюра–Блоджетт–Шейба [37, 38] в рамках сверхзвукового электронного возбуждения, взаимодействующего с акустическим солитоном Тоды.

В недавних работах Гайдидея, Христиансена, Эйлбека и Энольского [39, 40] было показано, что ангармоническая давыдовская модель сводится к системе Энона–Элиса [41]. Ими было также найдено новое семейство

эллиптических солитонов, переносящих энергию со скоростью, превышающей скорость звука.

В этой главе, основу которой составляют работы [15, 21], мы продолжаем изучение свойств ангармонической давыдовской модели, опираясь на вышеуказанную её связь с системой Энона–Элиса. Основное внимание при этом уделяется вопросу взаимодействия давыдовского и акустического солитонов. Результаты наших исследований удачно дополняются совсем недавней независимой интересной работой Золотарюка, Спатчека и Савина [42], посвящённой тому же вопросу.

В следующем разделе выводятся уравнения движения квантовой частицы (внутримолекулярного возбуждения или избыточного заряда), взаимодействующей с деформациями цепочки. Поиск решения в виде бегущей волны приводит к системе, которая с точностью до знака массы одной из двух возникающих степеней свободы совпадает с обобщённой системой Энона–Элиса.

В разделе 1.3 мы, воспользовавшись известными для системы Энона–Элиса утверждениями, проанализировали существующие типы солитонных решений нашей системы в одном из её вполне интегрируемых случаев и показали, что наряду с акустическим и давыдовским стационарными солитонами существуют также и двугорбые, являющиеся в действительности двухсолитонным решением, включающим в качестве компонент первые два солитона.

В разделе 1.4 рассчитаны энергии всех этих солитонов в интегрируемом случае и показано, что энергия двугорбого солитона равна сумме энергий акустического и давыдовского солитонов, независимо от расстояния между солитонными компонентами двугорбого солитона.

В разделе 1.5 развивается вариационный подход к изучению солито-

нноподобных решений в неинтегрируемом случае. Показывается, что в сильноангармоничных цепочках давыдовский и акустический солитоны, притягиваясь, могут образовывать связанное состояние.

В разделе 1.6 проводится численное моделирование исходных дискретных уравнений движения системы и подтверждаются основные выводы предыдущих разделов.

Наконец, в заключительном разделе 1.7 коротко отмечаются основные результаты главы и обсуждается возможность их проявления в реальных молекулярных цепочках.

## 1.2. Уравнения движения ангармонической молекулярной цепочки

Мы будем исследовать транспорт энергии и заряда вдоль ангармонической молекулярной цепочки, основываясь на гамильтониане Давыдова (0.13), проанализированного в вводной главе. Как там уже отмечалось, этот гамильтониан равно применим к описанию как миграции внутримолекулярного возбуждения, так и переноса избыточного заряда. Поэтому и наше рассмотрение, хотя в дальнейшем мы часто не будем оговаривать этого специально, охватывает оба случая. Вслед за Давыдовым и Золотарюком [11, 12, 25, 26], уже в самом гамильтониане мы сделаем два приближения, которые, с одной стороны, уже позволяют нам достаточно далеко продвинуться аналитически и, в то же время, дадут ещё возможность выявить некоторые существенные особенности исследуемых явлений. Первое приближение связано с учётом в потенциальной энергии межмолекулярного взаимодействия (0.15) только кубического ангармонизма, что вполне допустимо при рассмотрении не слишком сильных смещений молекул. Второе же приближение заключается в учёте резонансного взаимодействия лишь

между соседними молекулами. Оно гораздо менее обосновано, ибо, как будет показано в следующих двух главах, в общем случае учёт нелокального характера межмолекулярных взаимодействий может весьма существенно изменить картину изучаемых явлений. Пожалуй, оправданием нам может служить то, что, по всей видимости, вклады ангармонизма и нелокальности достаточно независимы и привносят различные особенности в характер рассматриваемых явлений. Тем не менее, полной уверенности в этом нет и рассмотрение совместного влияния ангармонизма и нелокальности остается важной и интересной задачей дальнейших исследований.

С учётом вышеупомянутых приближений гамильтониан (0.13) примет вид

$$H = J \sum_n [2|\psi_n|^2 - \psi_n^*(\psi_{n+1} + \psi_{n-1})] + \chi \sum_n |\psi_n|^2 (\beta_{n+1} - \beta_{n-1}) + \frac{1}{2} \sum_n \left[ M \left( \frac{d\beta_n}{dt} \right)^2 + \omega (\beta_{n+1} - \beta_n)^2 - \frac{2}{3} \alpha \omega (\beta_{n+1} - \beta_n)^3 \right], \quad (1.1)$$

где  $\psi_n(t)$  – амплитуда внутримолекулярного возбуждения  $n$ -той молекулы, а  $\beta_n(t)$  – смещение  $n$ -той молекулы из положения равновесия;  $J$  – энергия резонансного взаимодействия;  $\chi$  – параметр связи внутримолекулярных возбуждений со смещениями молекул;  $M$  – масса молекулы и, наконец, параметры  $\omega$  и  $\alpha$  характеризуют величины продольной упругости и кубического ангармонизма цепочки, соответственно.

Этому гамильтониану соответствует система уравнений движения полей  $\psi_n(t)$  и  $\beta_n(t)$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi_n(t) = J(2\psi_n - \psi_{n+1} - \psi_{n-1}) + \chi(\beta_{n+1} - \beta_{n-1})\psi_n, \quad (1.2)$$

$$M \frac{d^2}{dt^2} \beta_n(t) = \omega(\beta_{n+1} + \beta_{n-1} - 2\beta_n)(1 - \alpha(\beta_{n+1} - \beta_{n-1})) + \chi(|\psi_{n+1}|^2 - |\psi_{n-1}|^2), \quad (1.3)$$

которая описывает энергетические возбуждения, часто называемые двухкомпонентными, — для отличия их от однокомпонентных солитонных ре-

шений уравнений типа Кортевега – де Фриза, Буссинеска, Нелинейного Шрёдингера и др.

Инвариантность гамильтониана (1.1) относительно фазового преобразования  $\psi_n(t) \rightarrow \psi_n(t) \exp(i\gamma)$  приводит к сохранению числа возбуждений в цепочке. Предполагая, что переносится лишь одно возбуждение, мы можем записать условие нормировки волновой функции  $\psi_n(t)$  в виде

$$\sum_n |\psi_n(t)|^2 = 1 , \quad (1.4)$$

Полученную систему уравнений (1.2)–(1.3) мы будем в дальнейшем решать численно. Сейчас же, чтобы продвинуться дальше аналитически, предположим, что функции  $\psi_n$  и  $\beta_n$  мало меняются на протяжении одного звена цепочки и мы можем перейти в рассматриваемых уравнениях к континуальному пределу, положив

$$\psi_n(t) \rightarrow e^{ikx} \psi(x, t) \quad \text{и} \quad \beta_n(t) \rightarrow \beta(x, t) . \quad (1.5)$$

В этом случае

$$\psi_{n\pm 1}(t) \rightarrow e^{ik(x \pm \ell)} \left\{ 1 \pm \ell \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\ell^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots \right\} \psi(x, t) , \quad (1.6)$$

$$\beta_{n\pm 1}(t) \rightarrow \left\{ 1 \pm \ell \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\ell^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \pm \frac{\ell^3}{6} \frac{\partial^3}{\partial x^3} + \frac{\ell^4}{24} \frac{\partial^4}{\partial x^4} + \dots \right\} \beta(x, t) .$$

Здесь  $\psi(x, t)$  и  $\beta(x, t)$  – плавные вещественные функции пространственной переменной  $x = n \cdot \ell$ , где  $\ell$  – постоянная решетки, а  $k$  – волновой вектор, определяющий, как мы увидим в дальнейшем, скорость перемещения возбуждения. Система (1.2)–(1.3) перейдет при этом в систему уравнений в частных производных

$$i\hbar \partial_t \psi = E(k) \psi - i\hbar v_g(k) \partial_x \psi - J(k) \ell^2 \partial_x^2 \psi + 2\chi \ell (\partial_x \beta) \psi , \quad (1.7)$$

$$M \partial_t^2 \beta = \ell \partial_x \{ \omega (1 + \ell^2 \partial_x^2 / 12) (\ell \partial_x \beta) - \alpha \omega (\ell \partial_x \beta)^2 + 2\chi |\psi|^2 \} , \quad (1.8)$$

где  $J(k) = J \cos(k\ell)$ ,  $E(k) = 2(J(0) - J(k))$  — энергия экситонного, в виде плоских волн, возбуждения, а

$$v_g(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk} = \frac{2J\ell}{\hbar} \sin(k\ell), \quad (1.9)$$

его же групповая скорость. Условие нормировки (1.4) запишется теперь в виде

$$\frac{1}{\ell} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (1.10)$$

Необходимо отметить важность учёта в уравнении (1.8) дисперсионного слагаемого  $\partial_x^4 \beta$ . Как стало ясно из работ Давыдова и Золотарюка [11, 12], именно пренебрежение дисперсией звуковых волн в их ранних исследованиях [25, 26] обуславливало невозможность перемещения локализованных возбуждений со сверхзвуковой скоростью.

В случае стационарных возбуждений, распространяющихся с постоянной скоростью  $v$ , можно перейти в движущуюся систему координат  $\vartheta = (x - vt)/\ell$ . При этом, вводя новые, безразмерные, переменные

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= (8\Delta)^{-1/2} e^{-i\Omega t} \varphi(\vartheta), \\ \frac{\partial \beta}{\partial x} &= -\frac{J(k)}{\chi} u(\vartheta), \end{aligned} \quad (1.11)$$

где

$$\Delta = \frac{3\chi^2}{\omega J(k)}, \quad (1.12)$$

определяет силу экситон–фононной связи,  $\varphi(\vartheta)$  — огибающая волновой функции,  $u(\vartheta)$  — деформационная функция, а  $\Omega$  — спектральный параметр, мы сведем систему (1.7)–(1.8) к системе двух обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\ddot{\varphi} - A\varphi + 2u\varphi = 0, \quad (1.13)$$

$$\frac{d^2}{d\vartheta^2}(\ddot{u} - 4Bu + gu^2 - \varphi^2) = 0. \quad (1.14)$$

Здесь каждая точка над переменной означает дифференцирование по  $\vartheta$ , а безразмерные параметры  $A$ ,  $B$  и  $g$  задаются выражениями

$$A = \frac{E(k) - \hbar\Omega}{J(k)}, \quad B = 3 \left( \frac{v^2}{v_0^2} - 1 \right), \quad g = \frac{12\alpha J(k)}{\chi}, \quad (1.15)$$

где  $v_0 = \ell\sqrt{\omega/M}$  — скорость продольного звука в цепочке. При этом скорость возбуждения  $v$  и волновой вектор  $k$  связываются равенством  $v = v_g(k)$ , то есть возбуждение будет перемещаться со скоростью, равной групповой скорости  $v_g(k)$  экситона при данном значении волнового вектора. Легко видеть из (1.9), что ни при каком  $k$  эта скорость не может превышать максимальную скорость  $v_b \equiv 2J\ell/\hbar$  резонансного переноса возбуждения между молекулами при их жёстком закреплении в цепочке.

Условие нормировки (1.10) принимает теперь свой окончательный вид

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^2(\vartheta) d\vartheta = 8\Delta. \quad (1.16)$$

В приближении бесконечно длинной цепочки с граничными условиями

$$\dot{u}(\pm\infty) = \ddot{u}(\pm\infty) = \ddot{u}(\pm\infty) = \varphi(\pm\infty) = \dot{\varphi}(\pm\infty) = 0. \quad (1.17)$$

уравнение (1.14) можно два раза проинтегрировать. В результате оно reduцируется к

$$\ddot{u} - 4Bu + gu^2 - \varphi^2 = \Pi, \quad (1.18)$$

где  $\Pi = gu^2(-\infty) - 4Bu(-\infty)$  — постоянная интегрирования, равная нулю в случае свободных границ цепочки и отличная от нуля, если к ним приложена внешняя сила. Анализ последнего случая, проведенный Гайдидеем<sup>1</sup>, указал на весьма интересную возможность управления транспортом энергии в квазиодномерных молекулярных монокристаллах с помощью воздействия на кристалл внешним давлением. Мы ещё вспомним об этом в

---

<sup>1</sup>Частное сообщение

следующем разделе, но основное внимание уделим всё же случаю  $\Pi = 0$ , для которого система (1.13)–(1.14) примет вид

$$\ddot{\varphi} - A\varphi + 2u\varphi = 0 , \quad (1.19)$$

$$\ddot{u} - 4Bu + gu^2 - \varphi^2 = 0 . \quad (1.20)$$

До сих пор наше исследование не было оригинальным. Вывод этой системы уравнений был осуществлен ещё в 1983 году Давыдовым и Золотарёком [11]. Однако, приступая ко второй части своего исследования, — решению полученных уравнений, — они ещё не могли знать о проводившемся в то же время [43] анализе условий интегрируемости очень похожей системы, — системы Энона–Эллиса. Видимо, именно поэтому они пошли по весьма громоздкому и трудоёмкому пути, сводя систему к интегральному уравнению. Этот подход позволял находить лишь симметричные колоколообразные решения, но и те, фактически, необходимо было вначале угадать. В результате исследователям не удалось отыскать все имеющиеся солитоноподобные решения системы. В частности, ими были пропущены двугорбые солитоны, изучению которых, в основном, и посвящена данная глава.

Иной метод решения системы (1.19)–(1.20) был предложен Гайдидеем, Илбеком, Христиансеном и Энольским [39, 40]. Как ими было замечено, уравнения (1.19)–(1.20) являются уравнениями движения механической системы с лагранжианом

$$L = T - U , \quad (1.21)$$

где эффективная кинетическая энергия

$$T = \frac{1}{2}(\dot{\varphi}^2 - \dot{u}^2) , \quad (1.22)$$

а эффективный потенциал

$$U = -\frac{A}{2}\varphi^2 + 2Bu^2 + \varphi^2u - \frac{g}{3}u^3 . \quad (1.23)$$

После очевидных преобразований

$$\vartheta \rightarrow i\tau , \quad \varphi \rightarrow iq_1 , \quad u \rightarrow -q_2 , \quad (1.24)$$

этот лагранжиан совпадёт с лагранжианом

$$L_{HH} = \frac{1}{2}(\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2 - Aq_1^2 - 4Bq_2^2) - q_1^2q_2 - \frac{g}{3}q_2^3 , \quad (1.25)$$

уже давно и довольно хорошо изученной [43, 44] стандартной обобщённой системы Энона–Элиса, предложенной первоначально Эноном и Элисом [41] для моделирования нерегулярного движения звезды в среднем поле галактики. Столь малое в *математическом* отношении отличие нашей системы от системы Энона–Элиса позволяет воспользоваться результатами анализа условий интегрируемости последней. В то же время, однако, при нахождении конкретных решений нельзя забывать об одном важном отличии, — в нашем случае масса одной из степеней свободы отрицательна, что привносит в анализ свои существенные особенности.

Любопытно отметить, что поиски солитонных решений как нашей системы (1.19)–(1.20), так и системы Энона–Элиса (1.25) предпринимались в Японии ещё в семидесятых годах, до исследований Давыдова и Золотарюка [11, 12]. И связаны они были с изучением распространения нелинейных волн в плазме [27] и в двухатомных цепочках [28].

В плазме  $\psi$  описывает амплитуду ленгмюровских волн, а  $\beta$  — отклонение плотности ионов от равновесного значения. Но в отличие от нашего случая ( $g > 0$ ), в плазме параметр  $g = -2\gamma_e \approx -6$  отрицателен и жёстко определён значением показателя адиабаты  $\gamma_e$ , всегда очень близким к тройке. Тем не менее, найденное в [27] решение

$$\varphi(\vartheta) = 2\sqrt{3A(A-B)} \frac{\sinh(\sqrt{A}\vartheta)}{\cosh^2(\sqrt{A}\vartheta)} , \quad u(\vartheta) = \frac{3A}{\cosh^2(\sqrt{A}\vartheta)} , \quad (1.26)$$

имеется и в нашем случае. Оно существует, с учётом условия нормировки

(1.16), которое даёт связь

$$\sqrt{A}(A - B) = \Delta , \quad (1.27)$$

только при одной скорости, определяемой равенством

$$B = (3g - 2) \left[ \frac{\Delta}{6(2 - g)} \right]^{2/3} . \quad (1.28)$$

При этом, поскольку и  $B$ , и параметр

$$A = \left[ \frac{4\Delta}{3(2 - g)} \right]^{2/3} , \quad (1.29)$$

должны быть действительными, мы приходим к выводу, что решение это существует при любом  $g_{min} < g < 2$ , где отрицательное  $g_{min}$  определяется условием  $B > -3$ . При  $g < 2/3$  скорость солитона меньше звуковой, а при увеличении  $g$  от  $2/3$  до  $2$  скорость его увеличивается от звуковой до бесконечности.

В отличие от плазмы и нашей цепочки, двухатомная цепочка [28] описывается самой системой Энона–Элиса (1.25), где  $q_1$  соответствует амплитуде оптических колебаний, а  $q_2$  – сгущению центров масс двухатомной ячеек. При этом параметр  $g = 3/(m/M + M/m - 1)$ , где  $m$  и  $M$  – массы атомов цепочки, может принимать значения от нуля до трёх. Одно из найденных для этой системы решений совпадает с вышеупомянутым (1.26) решением в плазме, а второе – со сверхзвуковым солитоном, найденным Давыдовым и Золотарюком [11, 12] для исследуемой нами молекулярной цепочки. Оно будет ещё обсуждаться в следующем разделе.

Следует отметить, что к сожалению, ни в одной из этих ранних работ не проводился анализ устойчивости найденных солитонных решений. Но поскольку в рассматриваемых там случаях (кроме  $g = 1$ ) обе системы (1.19)–(1.20) и (1.25) являются неинтегрируемыми, устойчивость этих решений внушает сильные подозрения. Кроме того, и в плазме ( $g = -6$ ), и в

двухватомной цепочке ( $0 < g < 3$ ) параметр  $g$  не может равняться шести, и потому в них отсутствуют наиболее интересные, на наш взгляд, типы солитонных решений, к анализу которых мы теперь и приступим.

### 1.3. Солитонные решения в интегрируемом случае

*Это стоило мне величайших усилий и всё ещё стоит мне величайших усилий — осознать, что несказанно большее содержание заключается в том, как называются вещи, чем в самих вещах.*

*Фридрих Ницше, “Весёлая наука”.*

Хорошо известно [49], что при нарушении интегрируемости динамической системы в первую очередь разрушаются её сепаратрисы, которые и соответствуют солитонным решениям. И хотя, как было указано в конце предыдущего раздела, некоторые солитоноподобные решения существуют и в неинтегрируемом случае, вопрос их устойчивости внушает серьёзные подозрения и нуждается в дальнейших исследованиях. Поэтому первоначально мы рассмотрим случаи, когда система (1.19)–(1.20) является интегрируемой. Таких случаев всего три и они полностью совпадают с соответствующими им случаями интегрируемости системы Энона–Элиса [43, 44, 45, 46]

**A = 4B, g=1.** В этом случае переменные разделяются в координатах

$i\varphi + u$  и  $i\varphi - u$ , а второй интеграл движения имеет вид

$$I = \dot{\varphi}\dot{u} - A\varphi u + \varphi u^2 - \frac{1}{3}\varphi^3. \quad (1.30)$$

**4A = B, g=16.** В этом случае второй интеграл имеет четвёртую степень по импульсам.

**A и B – любые, g=6.** В этом случае переменные разделяются в параболических координатах, а второй интеграл движения имеет вид

$$I = \frac{1}{4}\varphi^4 - \varphi^2 u^2 - \dot{\varphi}(\dot{\varphi}u - \dot{u}\varphi) - A\varphi^2 u + (A - B)(\dot{\varphi}^2 - A\varphi^2). \quad (1.31)$$

Поскольку, как будет показано ниже, условие нормировки (1.16) налагает дополнительную связь между параметрами  $A$  и  $B$ , первые два случая могут реализоваться только при одном, полностью определяемом постоянными цепочки, значении скорости возбуждения.

Любопытно отметить следующие забавные и, быть может, далеко не случайные связи двух известных солитонных решений системы в неинтегрируемых её случаях с первым случаем интегрируемости. Одно из этих решений, которое мы уже выписывали (1.26), при  $g = 1$  даёт связь  $A = 4B = (4\Delta/3)^{2/3}$ , которая совпадает с условием интегрируемости системы! Второе из решений, — найденный Давыдовым и Золотарюком [11, 12] сверхзвуковой ( $B > 0$ ) солитон

$$\begin{aligned}\varphi(\vartheta) &= 3B\sqrt{g-2} \operatorname{sech}^2 \sqrt{B}(\vartheta - \vartheta_0), \\ u(\vartheta) &= 3B \operatorname{sech}^2 \sqrt{B}(\vartheta - \vartheta_0),\end{aligned}\quad (1.32)$$

существует *только* при  $A = 4B$ ! Однако условие  $g = 1$  здесь не только не требуется, но даже и не может быть выполнено ( $g$  всегда больше двух!).

Условие нормировки (1.16) приводит к равенству

$$B = \left[ \frac{2\Delta}{3(g-2)} \right]^{2/3}, \quad (1.33)$$

то есть солитон может распространяться только при одном значении скорости, которое полностью определяется параметрами решётки и меняется от бесконечности при  $g = 2$  до скорости звука при  $g \rightarrow \infty$ . Интересно, что и для этого решения, и для решения (1.26) значение параметра ангармонизма  $g = 2$  играет роль барьера, по разные стороны которого они и существуют. Это решение интересно ещё и тем, что именно оно реализует отмеченную на стр.25 возможность управления солитонным транспортом в квазидномерных монокристаллах с помощью воздействия на них внешним давлением. В разделе 1.4 мы найдём и обсудим значения энергий этих

солитонов.

Сейчас же мы рассмотрим третий случай интегрируемости системы, то есть будем предполагать, что имеется связь  $2\alpha J(k) = \chi$  между постоянной ангармонизма,  $\alpha$ , параметром экситон-фононной связи,  $\chi$ , энергией резонансного взаимодействия,  $J$ , и волновым вектором,  $k$ . Заметим, что для возбуждений с достаточно широкой зоной:  $2J > \chi/\alpha$  всегда можно подобрать волновой вектор  $k$ , удовлетворяющий нужное условие.

Вводя параболические координаты

$$\varphi = 2\sqrt{\mu_1\mu_2} \quad , \quad u = \mu_1 + \mu_2 - C \quad , \quad \text{где } C = \frac{2}{g-4}(A-B) \quad , \quad (1.34)$$

мы можем переписать Лагранжиан (1.21) в виде

$$L = \frac{1}{2}(\mu_1 - \mu_2) \left( \frac{\dot{\mu}_2^2}{\mu_2} - \frac{\dot{\mu}_1^2}{\mu_1} \right) - \frac{V(\mu_1) - V(\mu_2)}{\mu_1 - \mu_2} - U_{int} \quad , \quad (1.35)$$

где

$$V(\mu) = \mu(\mu - C)^2 \left( 2B + \frac{g}{3}C - \frac{g}{3}\mu \right) \quad , \quad (1.36)$$

а слагаемое

$$U_{int} = \left( 4 - \frac{2g}{3} \right) \mu_1\mu_2(\mu_1 + \mu_2) \quad , \quad (1.37)$$

разрушает интегрируемость системы.

При  $g = 6$  возмущение  $U_{int} = 0$  и мы приходим к системе типа Лиувилля (см. [50], §43 и §152), которая интегрируется в квадратурах

$$\frac{d\mu_1}{\sqrt{W(\mu_1)}} = \frac{d\mu_2}{\sqrt{W(\mu_2)}} = \frac{d\vartheta}{2(\mu_1 - \mu_2)} \quad , \quad (1.38)$$

где  $W(\mu) \equiv I_1\mu^2 + I_2\mu + 8\mu V(\mu)$ , а  $I_1$  и  $I_2$  являются постоянными интегрирования.

Из множества решений этой системы, детально изученных в [39, 40], нас сейчас интересуют лишь солитоноподобные, удовлетворяющие условиям

$$\varphi, u \rightarrow 0 \quad \text{при } \vartheta \rightarrow \pm\infty \quad . \quad (1.39)$$

В терминах параболических координат (1.34), эти граничные условия примут вид

$$\mu_1 \rightarrow 0, \mu_2 \rightarrow A - B \quad \text{при } \vartheta \rightarrow \pm\infty. \quad (1.40)$$

Поскольку этому соответствует  $I_1 = I_2 = 0$ , система (1.38) редуцируется к

$$\frac{d\mu_1}{\mu_1(\mu_1 - A + B)\sqrt{A - \mu_1}} = \frac{d\mu_2}{\mu_2(\mu_2 - A + B)\sqrt{A - \mu_2}} = \frac{2 d\vartheta}{\mu_1 - \mu_2}. \quad (1.41)$$

Существует лишь три солитоноподобных решения этой системы, а именно

**Сверхзвуковые акустические солитоны.** Полагая  $\mu_1 \equiv 0$ , мы сведём систему к уравнению Буссинеска, имеющему (см. напр. [14]) решение

$$\varphi = 0, \quad u = \frac{6}{g} B \operatorname{sech}^2 \sqrt{B}(\vartheta - \vartheta_0), \quad (1.42)$$

которое соответствует упругому сжатию, перемещающемуся по цепочке со сверхзвуковой скоростью (ибо  $B > 0$ ). Это решение существует при произвольных значениях ангармонизма  $g$ , что мы и подчеркнули, включив его явно в (1.42).

**Солитоны Давыдова-Золотарюка.** Полагая  $\mu_2 \equiv A - B$ , мы приходим к решению

$$\begin{aligned} \varphi &= 2\sqrt{A(A - B)} \operatorname{sech} \sqrt{A}(\vartheta - \vartheta_0), \\ u &= A \operatorname{sech}^2 \sqrt{A}(\vartheta - \vartheta_0), \end{aligned} \quad (1.43)$$

Впервые это решение было получено в работах Давыдова и Золотарюка [11, 12]. Соответствующие ему солитоны могут распространяться как с дозвуковой ( $B < 0$ ), так и со сверхзвуковой ( $B > 0$ ) скоростью. Однако условие  $g = 6$  должно теперь выполняться точно. Интересно отметить, что именно этим солитонам соответствуют давыдовские солитоны, существующие в молекулярных цепочках без дисперсии и ангармонизма и описываемые нелинейным уравнением Шрёдингера.

**Двугорбые солитоны.** Это решение, которое находится прямым, но довольно утомительным, интегрированием уравнений (1.41), имеет вид

$$\begin{aligned}\varphi &= 2\sqrt{A}(A - B)S^{-1}(\vartheta, R) \cosh \sqrt{B}(\vartheta - \vartheta_0 - R) , \\ u &= \frac{d^2}{d\vartheta^2} \ln S(\vartheta, R) ,\end{aligned}\quad (1.44)$$

где  $R$  – постоянная интегрирования, а

$$\begin{aligned}S(\vartheta, R) &= \sqrt{A} \cosh(\sqrt{B}(\vartheta - \vartheta_0 - R)) \cosh(\sqrt{A}(\vartheta - \vartheta_0)) \\ &\quad - \sqrt{B} \sinh(\sqrt{B}(\vartheta - \vartheta_0 - R)) \sinh(\sqrt{A}(\vartheta - \vartheta_0)) .\end{aligned}\quad (1.45)$$

Оно существует только при сверхзвуковых скоростях ( $B > 0$ ) и  $g = 6$ . Впервые его нашли Гайдидей, Илбек, Христиансен и Энольский в своей недавней работе [40]. Немного позже и *численно* его нашёл также Савин в своей докторской диссертации (см. [42]).

Записав последнее из решений, мы наконец можем чётко сформулировать задачу данной главы. Наша цель — попытаться понять, что же собой представляют двугорбые солитонные решения. Мы начнём с анализа их формы.

Но сначала разберёмся со значениями постоянных параметров, функциями которых являются решения (1.42)–(1.44). Два из них,  $\vartheta_0$  и  $R$ , являются постоянными интегрирования и могут принимать произвольные значения, — они определяют положение солитона в цепочке. Постоянная  $B$ , как это видно из (1.15), полностью определяется скоростью солитона. Остаётся лишь  $A$ , значение которого определяется значением спектрального параметра  $\Omega$ , которое мы найдем, используя условие нормировки (1.16). Весьма замечательно, что в итоге мы получим одно и то же уравнение

$$\sqrt{A}(A - B) = \Delta , \quad (1.46)$$

и для солитона Давыдова–Золотарюка, и для двугорбого солитона, для которого (!) утрачивается зависимость от  $R$ . Напомним, что точно такое же уравнение (1.27) возникало и для солитона (1.26), — странное совпадение.

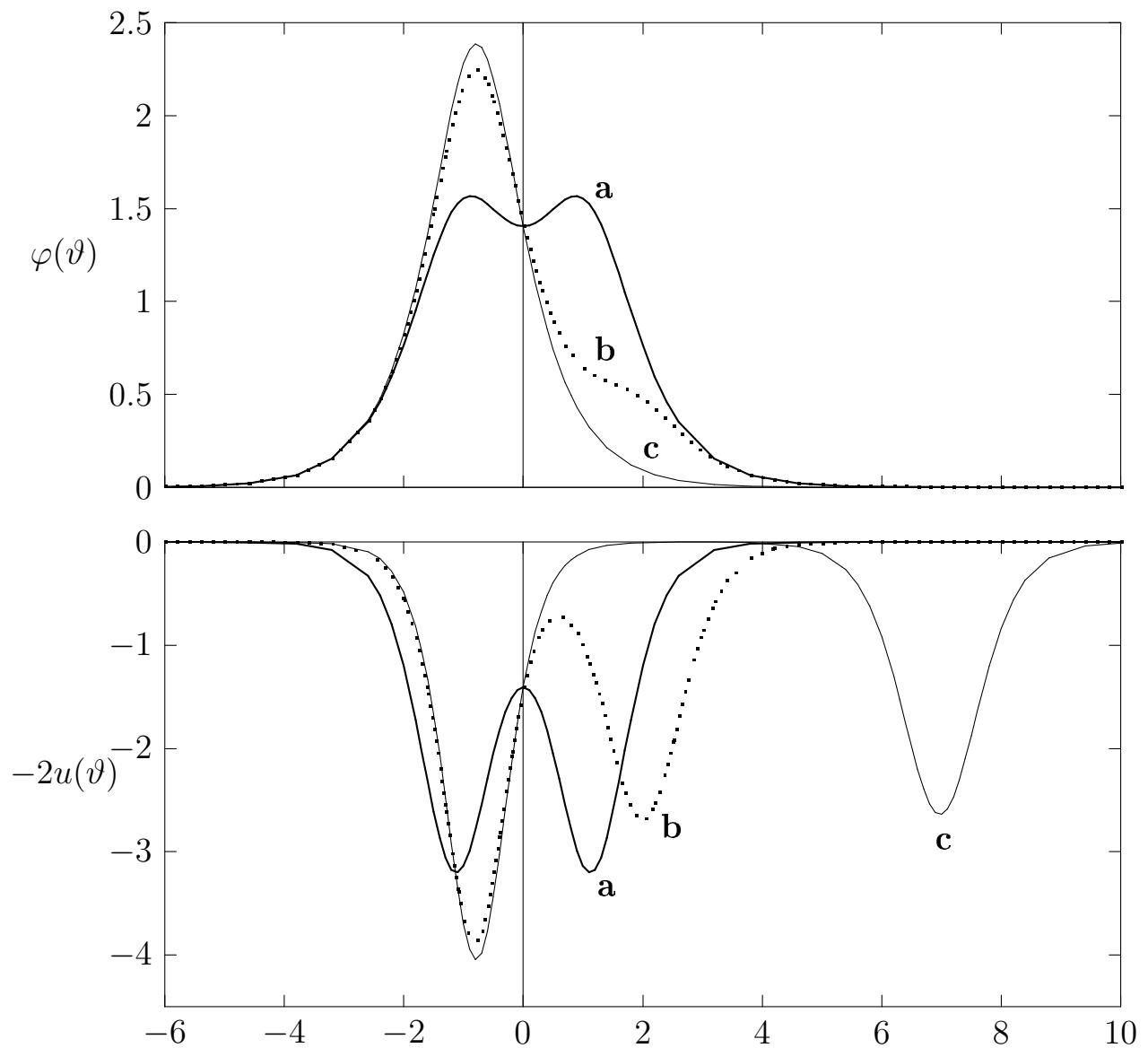


Рис. 1.1. Двугорбые солитоны при  $\Delta = 1$ ,  $v = 1.2v_0$  и  $\vartheta_0 = 0$  для различных значений  $R$ : **a)**  $R = 0$ , **b)**  $R = 1$ , **c)**  $R = 6$ .

Первая любопытная особенность двугорбых солитонов связана с тем, что выражение для  $u(\vartheta)$ , записанное выше в представлении Хироты, полностью совпадает с двухсолитонным решением уравнения Кортевега – де Фриза [51]. Это заставляет задуматься, — быть может, и двугорбый солитон является на самом деле двухсолитонным решением? Заметим, что уравнение (1.19) можно интерпретировать как уравнение Шрёдингера для квантовой частицы в двумном потенциале  $-2u(\vartheta)$ , который, в приближении  $|R| \gg 1/\sqrt{B}$ , имеет вид

$$\begin{aligned} -2u(\vartheta) = & -2 \left[ B \operatorname{sech}^2(\sqrt{B}(\vartheta - \vartheta_0 - R) - \delta) \right. \\ & \left. + A \operatorname{sech}^2(\sqrt{A}(\vartheta - \vartheta_0) + \delta) \right], \end{aligned} \quad (1.47)$$

где  $\delta = \operatorname{sgn}(R) \operatorname{arctanh}(\sqrt{B/A})$ . Поскольку, как видно из (1.46),  $A$  всегда больше  $B$ , максимум  $\varphi_B$  волновой функции  $\varphi(\vartheta)$ , связанный с первой ямой (первым слагаемым в формуле (1.47)), оказывается экспоненциально малым в сравнении с максимумом  $\varphi_A$ , связанным со второй ямой

$$\varphi_B/\varphi_A \simeq \operatorname{sech}\sqrt{A}R \quad \text{при } |R| \gg 1/\sqrt{B}. \quad (1.48)$$

Замечательно, что приближённый вид волновой функции при этом совпадает с волновой функцией солитона Давыдова–Золотарюка (1.43). Учитывая (1.47), мы видим, что при больших  $R$  двугорбый солитон является суммой двух других, — акустического и солитона Давыдова–Золотарюка, что подтверждает догадку о его двухсолитонной природе.

Если же  $R$  не велики, форма  $\varphi(\vartheta)$  для двугорбого солитона зависит от его скорости. Именно, независимо от значения  $R$ , волновая функция имеет один максимум при околозвуковых скоростях

$$v_0 < v < v_0 \left[ 1 + \left( \frac{\Delta^2}{54} \right)^{1/3} \right]^{1/2}, \quad (1.49)$$

и два максимума при гиперзвуковых скоростях

$$v > v_0 \left[ 1 + \left( \frac{\Delta^2}{4} \right)^{1/3} \right]^{1/2}. \quad (1.50)$$

При промежуточных скоростях её форма зависит от  $R$ , — она имеет два максимума при малых  $R$  и лишь один — при больших.

Таким образом, в заключение раздела мы приходим к выводу, что найденный Гайдидеем, Илбеком, Христиансеном и Энольским двугорбый солитон является, по сути, двухсолитонным решением, включающим в качестве компонент солитон Давыдова–Золотарюка и акустический солитон. Уже тот факт, что расстояние  $R$  между этими компонентами может быть любым, и при этом остаётся всё же неизменным, указывает на то, что энергия двугорбого солитона не зависит от значения  $R$  и, следовательно, в точности равна сумме энергий компонент. В следующем разделе мы подтверждим этот вывод непосредственными расчётами энергий солитонов. Отметим, что с учётом численных расчётов, которые демонстрируют упругий характер столкновений между любыми комбинациями акустических солитонов и солитонов Давыдова–Золотарюка при  $g = 6$ , результаты этого раздела дают веские основания *подозревать в интегрируемости* исходную систему уравнений в частных производных. Это тем более вероятно, что весьма сходная система связанных уравнений Шрёдингера (но только стационарного) и КdВ (а не Буссинеска, как у нас), как показал Мельников [52, 53], действительно является вполне интегрируемой.

#### 1.4. Энергия солитонных решений

*И в этом — воля, не ведающая смерти. Кто постигнет тайны воли во всей мощи её?*

*Джозеф Гленвили.*

Чтобы рассчитать энергию найденных в предыдущем разделе солито-

нов, подставим решение в виде бегущей волны (1.11) в гамильтониан (1.1) и перейдем к континуальному пределу. Учитывая, что для *всех* решений системы (1.19)–(1.20) имеет место первый интеграл движения  $T+U=const$ , где  $T$  и  $U$  определяются формулами (1.22)–(1.23), мы найдём, что обезразмеренная энергия *солитонных решений* системы определяется выражением

$$\mathcal{E} \equiv \frac{H}{2J(k)} = \frac{1}{8\Delta} \left\{ \left( \mathcal{E}_{ex}(v) - \frac{3}{10}A \right) \overline{\varphi^2} + \frac{12}{g} \left( 1 + \frac{4}{15}B \right) (\overline{\varphi^2} + 4B\overline{u}) \right\}, \quad (1.51)$$

где  $\mathcal{E}_{ex}(v)$  — обезразмеренная энергия экситона

$$\mathcal{E}_{ex}(v) = \frac{E(k)}{2J(k)}, \quad (1.52)$$

и введены обозначения

$$\overline{\varphi^2} = \int_{-\infty}^{\infty} d\vartheta \varphi^2(\vartheta), \quad \overline{u} = \int_{-\infty}^{\infty} d\vartheta u(\vartheta). \quad (1.53)$$

Для акустических солитонов (1.42) мы легко находим

$$\overline{\varphi^2} = 0, \quad \overline{u} \equiv u_{latt} = 2\sqrt{B}, \quad (1.54)$$

так что их энергия

$$\mathcal{E}_{latt} = \frac{12}{g\Delta} \left( 1 + \frac{4}{15}B \right) B^{3/2}. \quad (1.55)$$

Для всех остальных солитонов должно выполняться условие нормировки (1.16), которое можно переписать в виде  $\overline{\varphi^2} = 8\Delta$ . Поэтому их энергия

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{ex}(v) - \frac{3}{10}A + \frac{12}{g} \left( 1 + \frac{4}{15}B \right) \left( 1 + \frac{B}{2\Delta}\overline{u} \right), \quad (1.56)$$

определяется лишь значением  $\overline{u}$  и  $A(B)$ . Интересно заметить, что она линейно зависит от полного смещения молекул

$$\overline{u} = \frac{\chi}{\ell J(k)} (\beta(-\infty) - \beta(\infty)), \quad (1.57)$$

вызванного прохождением солитона по цепочке.

Для солитонов Давыдова–Золотарюка (1.43) это смещение

$$\bar{u} \equiv u_I = 2\sqrt{A}, \quad (1.58)$$

а потому их энергия, при  $g = 6$ , определяется выражением

$$\mathcal{E}_I = \mathcal{E}_{ex}(v) - \frac{3}{10}A + \frac{2}{5\Delta} \left(1 + 4\frac{v^2}{v_0^2}\right) A^{3/2}, \quad (1.59)$$

где  $A$  находится из уравнения (1.46). При малых скоростях эта энергия всегда меньше энергии экситона и, таким образом, солитон является энергетически более выгодным возбуждением. Однако при увеличении скорости, начиная с некоторой критической, ситуация меняется на противоположную. Поскольку более всего нас здесь интересуют сверхзвуковые солитоны, отметим, что для того, чтобы при скорости, равной скорости звука, энергия солитона была меньше энергии экситона, необходимо, чтобы параметр экситон–фононной связи  $\Delta$  превышал довольно таки огромное значение  $\Delta_{cr} \equiv (20/3)^{3/2} \approx 17.2$ .

В случае двугорбых солитонов (1.44)–(1.45) вызванное прохождением солитона смещение молекул

$$\bar{u} \equiv u_{II} = u_I + u_{latt}, \quad (1.60)$$

не зависит от расстояния  $R$  между его компонентами и равно сумме смещений, вызываемых ими по отдельности. Таким образом, вследствие линейности энергии по  $\bar{u}$ , энергия двугорбого солитона в точности равна сумме энергий акустического солитона и солитона Давыдова–Золотарюка, независимо от расстояния  $R$

$$\mathcal{E}_{II} = \mathcal{E}_I + \mathcal{E}_{latt}. \quad (1.61)$$

В заключение, найдём обещанные энергии двух экзотических солитонов (1.26) и (1.32). Исходя из общих квантовомеханических представлений,

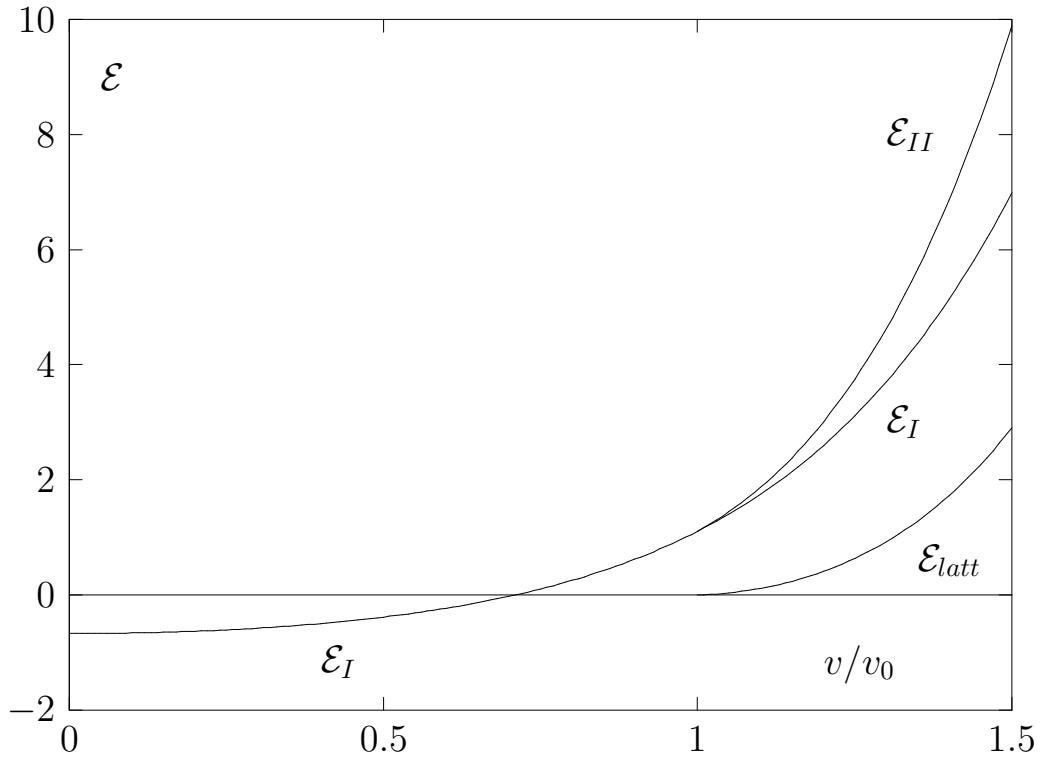


Рис. 1.2. Зависимость энергий солитонов от скорости при  $g = 6$  и  $\Delta = 10$ .

солитон (1.26), волновая функция которого имеет узел, должен являться неким “возбужденным”, высокоэнергетичным, образованием. И действительно, для него  $\bar{u} = 6\sqrt{A}$ , так что его энергия равна

$$\mathcal{E}_{pl} = \mathcal{E}_{ex}(v) + \frac{24}{2-g} + \frac{51g-38}{10(2-g)^{5/3}} \left[ \frac{4\Delta}{3} \right]^{2/3}. \quad (1.62)$$

При  $g = 2/3$ , когда скорость этого солитона равна скорости звука ( $B = 0$ ), мы получаем

$$\mathcal{E}_{pl} = \mathcal{E}_{ex}(v_0) + 18 - \frac{3}{10}\Delta^{2/3}, \quad (1.63)$$

что на 16 больше энергии  $\mathcal{E}_I(v_0)$  солитона Давыдова–Золотарюка! Заметим, что рост экситон–фононной связи  $\Delta$  приводит к уменьшению энергии солитона только если  $g < 38/51 \approx 0.745$ . Итак, судя по всему, даже если эти солитоны динамически устойчивы, что, однако, ещё необходимо проверить, они слишком высокоэнергетичны, чтобы играть какую-то роль в переносе энергии в цепочках на *далёкие* расстояния.

Второе решение, найденное Давыдовым и Золотарюком [11, 12], — сверхзвуковой солитон (1.32) даёт  $\bar{u} = 6\sqrt{B}$ , что приводит к энергии

$$\mathcal{E}_{DZ} = \mathcal{E}_{ex}(v) + \frac{12}{g-2} + \frac{28-6g}{5(g-2)^{5/3}} \left[ \frac{2\Delta}{3} \right]^{2/3}. \quad (1.64)$$

Как видим, и здесь увеличение экситон–фононной связи не всегда приводит к уменьшению энергии, а только при  $g > 28/6 \approx 4.67$ .

Удивительно, что при  $g = 6$ , когда скорость солитона равна

$$v_{sol} = v_0 \left[ 1 + \left( \frac{\Delta^2}{162} \right)^{1/3} \right]^{1/2}, \quad (1.65)$$

и для двугорбого солитона начинает выполняться соотношение  $A = 4B = 4(\Delta/6)^{2/3}$ , не только энергии этих солитонов

$$\mathcal{E}_{DZ} = \mathcal{E}_{ex}(v_{sol}) + 3 - \frac{2}{5} \left( \frac{\Delta}{6} \right)^{2/3} \equiv \mathcal{E}_{II}(v_{sol}), \quad (1.66)$$

но *да же и вид их (при  $R = 0$ ) полностью совпадает!* Интересно отметить, что А.В. Савин нашёл численно двугорбые солитоны, беря в качестве начального именно это солитонное решение. К сожалению, я ещё не выяснил точно, что же заставило его при всём этом дать двугорбому солитону неверную интерпретацию связанного состояния солитона Давыдова–Золотарюка с *двумя* акустическими солитонами.

Как уже отмечалось, по всей видимости вырождение энергии двугорбого солитона по  $R$  связано с весьма вероятной интегрируемостью исходной системы уравнений в частных производных (1.7)–(1.8), для которой и акустические солитоны и солитоны Давыдова–Золотарюка являются в таком случае *математическими солитонами*. Если это действительно так, то возникает важная и интересная задача построения *обратной задачи рассеяния* для этой системы. Другое направление дальнейших исследований, более интересное *физически*, связано с изучением неинтегрируемого

случая, когда  $g \neq 6$ , — ведь именно он реализуется в реальных молекулярных цепочках. Ясно, что в *этом* случае вырождение должно сняться и солитон Давыдова–Золотарюка будет *взаимодействовать* с акустическим. Но как именно? Возникает огромный соблазн распространить отмеченную выше тождественность двугорбого солитона (1.44) с солитоном (1.32) и на неинтегрируемый случай,  $g \neq 6$ , при котором последний солитон всё так же существует. Быть может, можно считать этот солитон частным случаем связанного состояния акустического солитона и солитона Давыдова–Золотарюка, именно, когда скорость солитона удовлетворяет равенство  $A = 4B$ , необходимое для того, чтобы форма двугорбого солитона выродилась в (1.32)? Мы постараемся выяснить всё это в ходе дальнейших исследований...

### 1.5. Вариационный подход к неинтегрируемому случаю

О! Страшных песен сих не пой!  
 Про древний хаос, про родимый  
 Как жадно мир души ночной  
 Внимает повести любимой!  
 Из смертной рвётся он груди,  
 Он с беспредельным жаждет слиться!..  
 О! Бурь заснувших не буди —  
 Под ними хаос шевелится!..

*Фёдор Тютчев, 1830.*

Приступая к исследованию неинтегрируемого случая, мы, намереваясь изучать *динамику* межсолитонных взаимодействий, уже не можем удовольствоваться рассмотрением только лишь стационарных солитонных решений системы (1.7)–(1.8). Необходимо явно учесть время, тем более, что солитон Давыдова–Золотарюка (1.43) уже не будет решением системы, — из-за её неинтегрируемости не будет даже строго стационарного аналога этого солитона. И тем не менее, — физика непрерывна и если  $g$  не слишком отличается от шестёрки, то солитон сей, взятый в качестве начального

условия, хотя и будет понемногу разрушаться, но<sup>2</sup> всё же достаточно медленно для того, чтобы выполнить свою миссию и обеспечить эффективный перенос энергии. Не надеясь решить систему (1.7)–(1.8) точно, мы воспользуемся этим фактом, чтобы развить ниже приближённый вариационный подход к проблеме.

Основой любого, включающего временную динамику, вариационного подхода является лагранжиан. В нашем случае лагранжиан, уравнениями движения которого являются уравнения (1.2)–(1.3), будет иметь вид

$$\begin{aligned} L(\psi_n, \partial_t \psi_n, \psi_n^*, \partial_t \psi_n^*, \beta_n, \partial_t \beta_n) = & i\hbar \sum_n \psi_n^* \partial_t \psi_n \\ & + \sum_n [J(\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n) - \chi(\beta_{n+1} - \beta_{n-1})\psi_n] \\ & + \frac{M}{2} \sum_n (\partial_t \beta_n)^2 - \frac{\omega}{2} \sum_n \left[ (\beta_{n+1} - \beta_n)^2 - \frac{2\alpha}{3}(\beta_{n+1} - \beta_n)^3 \right]. \end{aligned} \quad (1.67)$$

Перейдя к континуальному пределу (1.5)–(1.7), а заодно и к движущейся системе координат  $\vartheta = (x - vt)/\ell$ , и введя безразмерные переменные

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &\rightarrow \frac{\exp(-i\Omega t)}{\sqrt{8\Delta}} \varphi(\vartheta, \tau), \\ \beta(x, t) &\rightarrow \frac{J(k)}{\chi} \mathcal{B}(\vartheta, \tau), \end{aligned} \quad (1.68)$$

где  $\tau = (v_0/\ell)t$ , мы можем переписать его в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{8\Delta}{J(k)} L = \frac{2J}{J(k)} \frac{v_0}{v_b} i \int_{-\infty}^{\infty} d\vartheta \varphi^* \partial_\tau \varphi - \int_{-\infty}^{\infty} d\vartheta \{ |\partial_\vartheta \varphi|^2 + (A + 2\partial_\vartheta \mathcal{B})|\varphi|^2 \} \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} d\vartheta \left\{ 12(\partial_\tau \mathcal{B} - v \partial_\vartheta \mathcal{B})^2 - 12(\partial_\vartheta \mathcal{B})^2 + (\partial_\vartheta^2 \mathcal{B})^2 + \frac{2g}{3}(\partial_\vartheta \mathcal{B})^3 \right\}. \end{aligned} \quad (1.69)$$

Теперь вместо того, чтобы решать систему уравнений (1.7)–(1.8), мы можем минимизировать функционал действия  $\mathcal{S} = \int \mathcal{L} d\tau$ , — результат будет тем же. Однако и в таком виде задача всё ещё остаётся слишком сложной. Поэтому мы вынуждены пойти на хитрость, — используем в качестве  $\varphi(\vartheta, \tau)$  и  $\mathcal{B}(\vartheta, \tau)$  некоторые удобные для нас, но достаточно близкие к настоящему решению, *пробные* функции и будем минимизировать действие

---

<sup>2</sup>Как показывают численные расчёты из следующего раздела.

$\mathcal{S}$  по всем параметрам, в них входящим. Если нам повезёт и выбор пробной функции окажется удачным, результаты этого вариационного метода будут близки к реальности.

Поскольку наибольший интерес сейчас для нас представляют двугорбые солитоны (1.44), используем в качестве пробной функции именно это решение. Немного подкорректировав его, чтобы сразу же удовлетворить условие нормировки (1.16) и тем самым сделать все параметры пробной функции независимыми, мы приходим к

$$\begin{aligned}\varphi(\vartheta, \tau) &= 2\sqrt{\gamma(\gamma^2 - \eta^2)\Delta} \cosh \eta(\vartheta - R)/S(\vartheta, R) , \\ \mathcal{B}(\vartheta, \tau) &= -\frac{\partial}{\partial \vartheta} \ln S(\vartheta, R) ,\end{aligned}\quad (1.70)$$

где

$$S(\vartheta, R) = \gamma \cosh(\gamma \vartheta) \cosh \eta(\vartheta - R) - \eta \sinh(\gamma \vartheta) \sinh \eta(\vartheta - R) , \quad (1.71)$$

а  $\gamma, \eta$  ( $\gamma > \eta$ ) и  $R$  – вариационные параметры. Будем считать, что  $\gamma$  и  $\eta$  постоянны, а  $R = R(\tau)$  является функцией времени. Это пробное решение является точным при  $g = 6$  и

$$\gamma = \sqrt{A} , \quad \eta = \sqrt{B} , \quad R = \text{const} . \quad (1.72)$$

Расстояние  $R$  между компонентами солитона может быть любым и не меняется со временем, поскольку лагранжиан  $\mathcal{L}$  не зависит, при  $g = 6$ , от  $R$ .

Это вырождение снимается, однако, когда  $g \neq 6$ . К сожалению, при этом не удается взять все интегралы в выражении (1.70) точно. Но в приближении  $\eta \ll \gamma$  мы приходим к эффективному лагранжиану

$$\mathcal{L} \approx \mathcal{L}_0(\gamma, \eta) + (g - 6) \frac{4\Delta\gamma^2}{3} \mathcal{Q}(R, \gamma, \eta) + 16\eta^3 \left( \frac{dR}{d\tau} \right)^2 , \quad (1.73)$$

где

$$\mathcal{L}_0(\gamma, \eta) \approx 8\Delta \left[ \frac{2}{3}B - A + \frac{3}{5}\gamma^2 - \frac{2}{5}\eta^2 \right] - 16\gamma\eta^2 \left( \frac{\eta^2}{5} - \frac{B}{3} \right) + (g-6)\frac{16\Delta\gamma^2}{15}, \quad (1.74)$$

а зависимость от  $R$  задаётся функцией

$$\mathcal{Q}(R, \gamma, \eta) \approx \frac{4}{3} + \frac{2}{3} \left( \frac{\eta}{\gamma} \right)^2 (4 - \operatorname{sech}^2(\eta R)) . \quad (1.75)$$

При этом, считая, что значения параметров  $\gamma$  и  $\eta$  определяются выражением (1.72), мы находим, что энергия двугорбого солитона становится равной

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{II} &\simeq \mathcal{E}_I + \mathcal{E}_{latt} + \frac{B^{3/2}}{\Delta} \left( \frac{dR}{d\tau} \right)^2 \\ &+ \frac{g-6}{18} \left[ \frac{4}{5}\Delta^{2/3} + B(4 - \operatorname{sech}^2(\sqrt{B}R)) \right] . \end{aligned} \quad (1.76)$$

Если  $g < 6$ , то она имеет минимумы при  $R \rightarrow \pm\infty$ , а если  $g > 6$ , то её единственным минимумом является  $R = 0$ .

Но рассмотрим более подробно динамику зависимости  $R(\tau)$ . Эффективному Лагранжиану (1.67) соответствует уравнение движения

$$\frac{d^2R}{d\tau^2} + \frac{\nu^2}{\sqrt{B}} \frac{\sinh(\sqrt{B}R)}{\cosh^3(\sqrt{B}R)} = 0 , \quad (1.77)$$

где параметр  $\nu^2 = (g-6)\sqrt{B}\Delta/18$ .

Как видим, если  $g < 6$  расстояние  $R \rightarrow \infty$  при  $\tau \rightarrow \infty$ , то есть двугорбый солитон распадается на акустический и Давыдова–Золотарюка, которые отталкивают друг друга.

И напротив, если  $g > 6$  расстояние  $R$  является периодической функцией времени

$$\sinh(\sqrt{B}R) = \sinh(\sqrt{B}R_0) \cos \frac{2\pi}{T}(\tau - \tau_0) , \quad (1.78)$$

где период колебаний,  $T$ , равен

$$T = \frac{2\pi}{\nu} \cosh(\sqrt{B}R_0) . \quad (1.79)$$

В этих формулах  $R_0$  — начальное значение  $R$ , а  $\tau_0$  — начальный момент времени. Как видим, в данном случае акустический солитон и солитон Давыдова–Золотарюка образуют связанное состояние с периодом колебаний, экспоненциально растущим с ростом амплитуды колебаний  $R_0$ .

Но чтобы поверить во все эти результаты, было бы неплохо убедиться в корректности сделанных выше приближений. И, пожалуй, наиболее прямой и надёжный путь для этого, — численное решение исходных уравнений (1.2)–(1.3), чем мы и займёмся в следующем разделе.

## 1.6. Мир численных расчетов

*И мир этот так приятно сумасброден! Ведь он — грёза опьянённого бога, ... и сновидения его бывают то пестры и нелепы, то стройны и разумны ... Но настанет час, и бог проснётся, прotrёт заспанные глаза, усмехнётся — и наш мир растает без следа, да он, пожалуй, и не существовал вовсе ...*

*Генрих Гейне, “Идеи. Книга Легран”.*

Итак, в этом разделе мы проверим численно динамическую устойчивость и характер взаимодействия пары близко расположенных солитонов: акустического и Давыдова–Золотарюка. При этом воспользуемся моделью цепочки из 70–100 молекул, свёрнутой в кольцо (периодические граничные условия<sup>3</sup>). Для численного решения уравнений (1.2)–(1.3) применялся явный метод Рунге–Кутта *восьмого* порядка с автоматическим выбором шага интегрирования, разработанный в 1980 году Дорманом и Принсом [54]. Реализация этого метода на Фортране дана в прекрасной монографии Хайрера, Нёрсетта и Ваннера [55]. Как показывают проведённые там сравнения, этот метод является наилучшим при точных (но не слишком) расчётах, характерных для нашего случая. При точности  $\sim 10^{-8}$  на один шаг интегрирования, он допускал довольно большой ( $\Delta\tau = 0.9 \div 1.0$ )

---

<sup>3</sup>Впрочем, как это и должно быть, дополнительные численные расчёты указывают на незначительность роли граничных условий в таких длинных цепочках

шаг по времени. Дополнительно точность расчётов контролировалась по сохранению полной энергии (1.1) системы (с точностью 0.2% за весь промежуток интегрирования) и условия нормировки (1.4) волновой функции (0.5%). Во всех расчётах в качестве начального условия использовалось решение в виде двухгорбого солитона (1.44) при слабой экситон–фононной связи  $\Delta = 0.009$  и скорости  $v$ , равной  $1.05v_0$ .

На рис.1.3–1.5 изображены результаты численного моделирования при *докритическом* значении ангармонизма  $g = 4.25$ . Принималось, что в начальный момент времени солитон был симметричным ( $R = 0$ ). Видно, что в соответствии с результатами вариационного анализа, проведённого в предыдущем разделе, акустический и давыдовский солитоны, отталкивая друг друга, расходятся.

На рис.1.6–1.10 представлены результаты для *сверхкритического* значения ангармонизма  $g = 8.5$ . Мы видим, что несимметричный в начальный момент времени, солитон становится симметричным ( $R = 0$ ) при  $\tau = 155$ , затем зеркально–отражённым к начальному при  $\tau = 351$ , вновь симметричным при  $\tau = 540$  возвращается, наконец, к исходной форме при  $\tau = 646$  и т.д. Таким образом, в соответствии с результатами вариационного анализа, акустический и давыдовский солитоны образуют связанное состояние и демонстрируют близер–подобное поведение. Период их осциляций действительно близок к (1.79).

Если считать, что вдоль цепочки переносится заряженное возбуждение (избыточные электрон или дырка), то можно предположить, что такое их связанное состояние с акустическим солитоном будет резонансно взаимодействовать с внешним электромагнитным переменным полем. И действительно, как показывает численное моделирование этого случая, при частоте ЭМП, совпадающей с частотой колебаний связанного состояния,

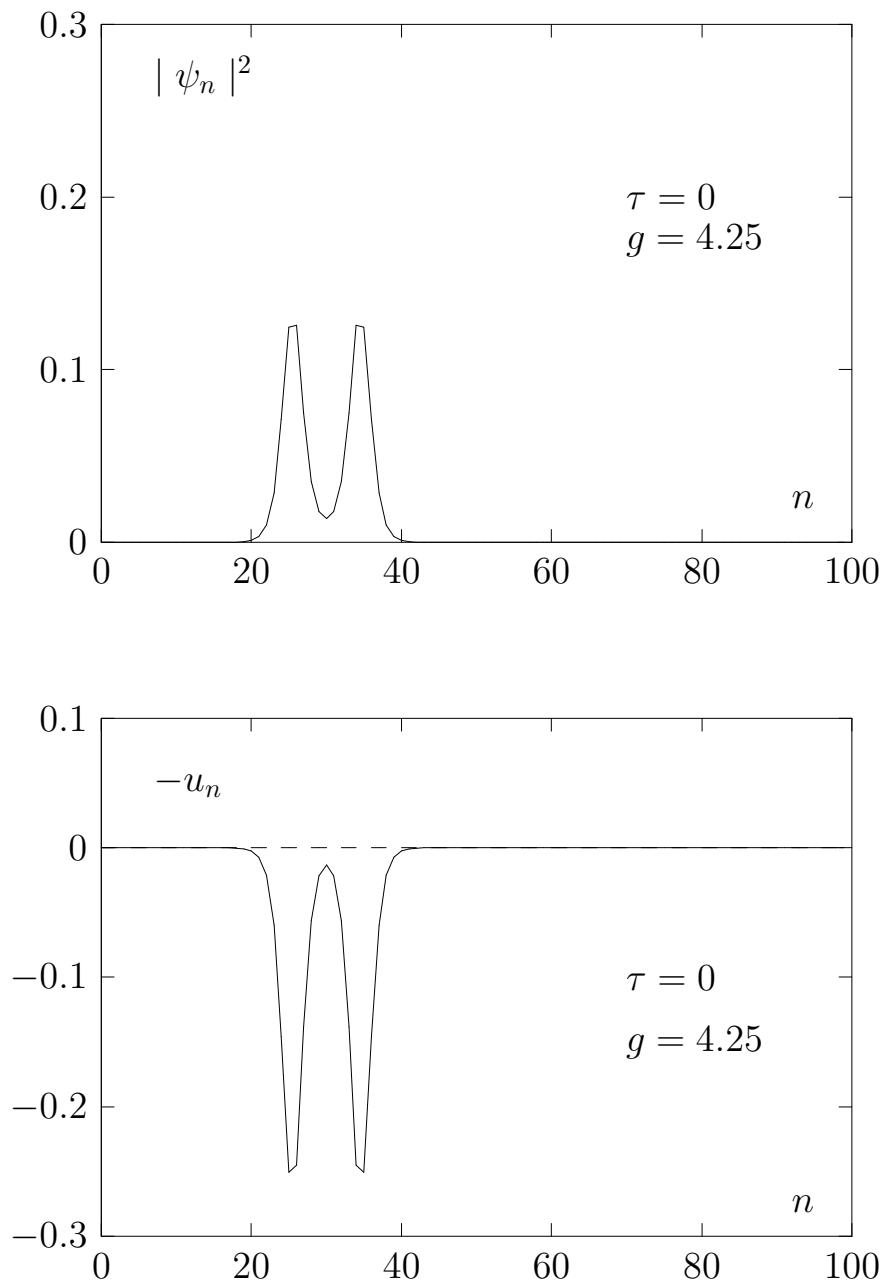


Рис. 1.3. Численное моделирование двугорбого солитона при слабом ангармонизме:  $\tau = 0$

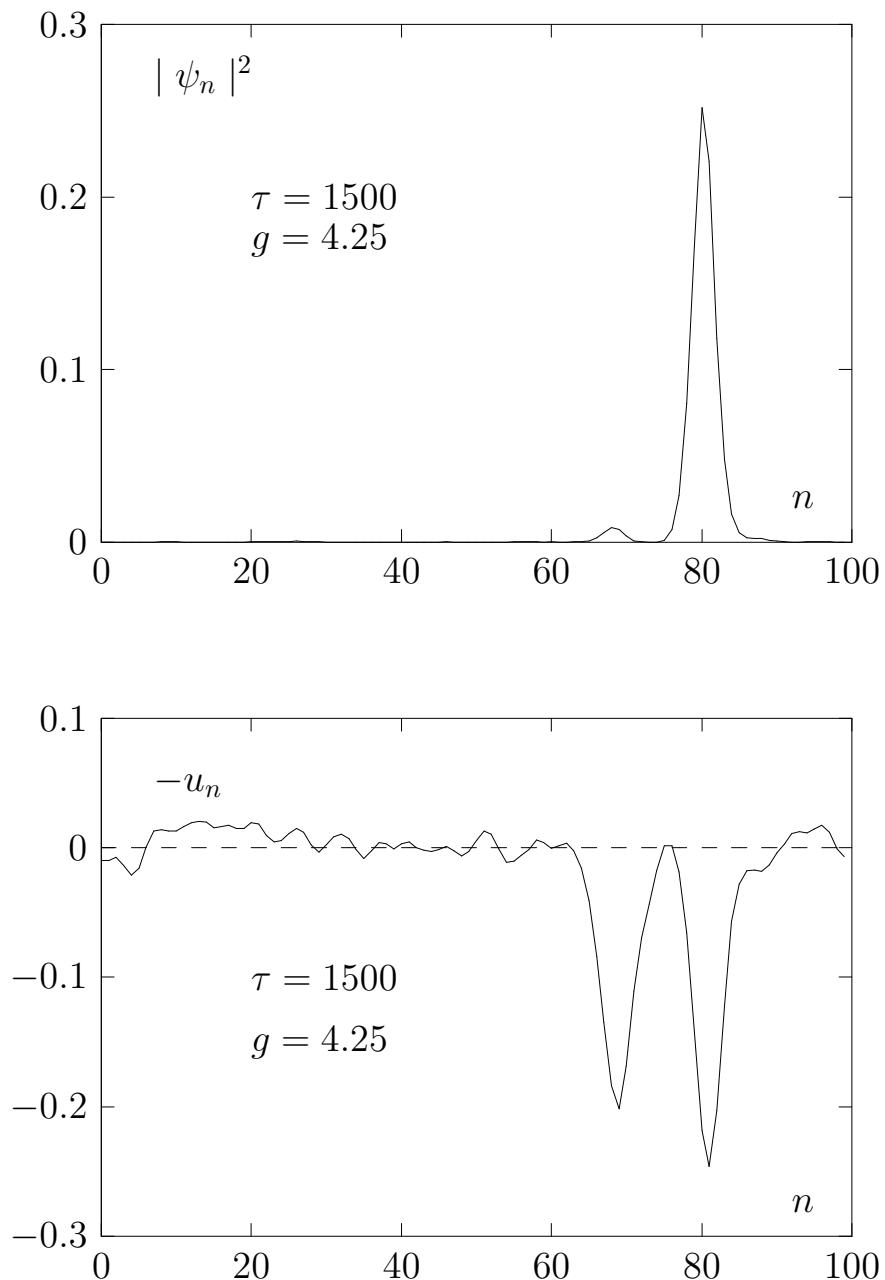


Рис. 1.4. Численное моделирование двугорбого солитона при слабом ангармонизме:  $\tau = 1500$

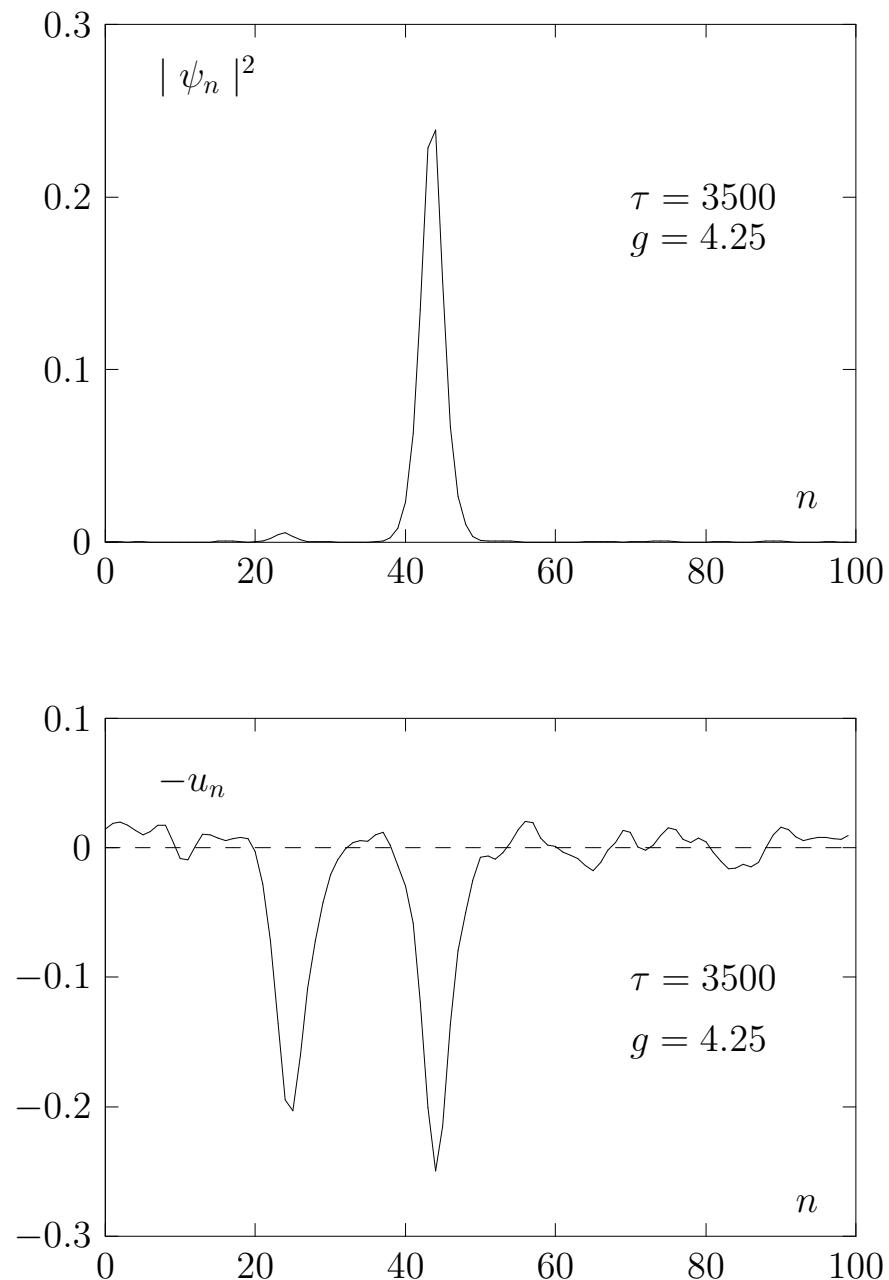


Рис. 1.5. Численное моделирование двугорбого солитона при слабом ангармонизме:  $\tau = 3500$

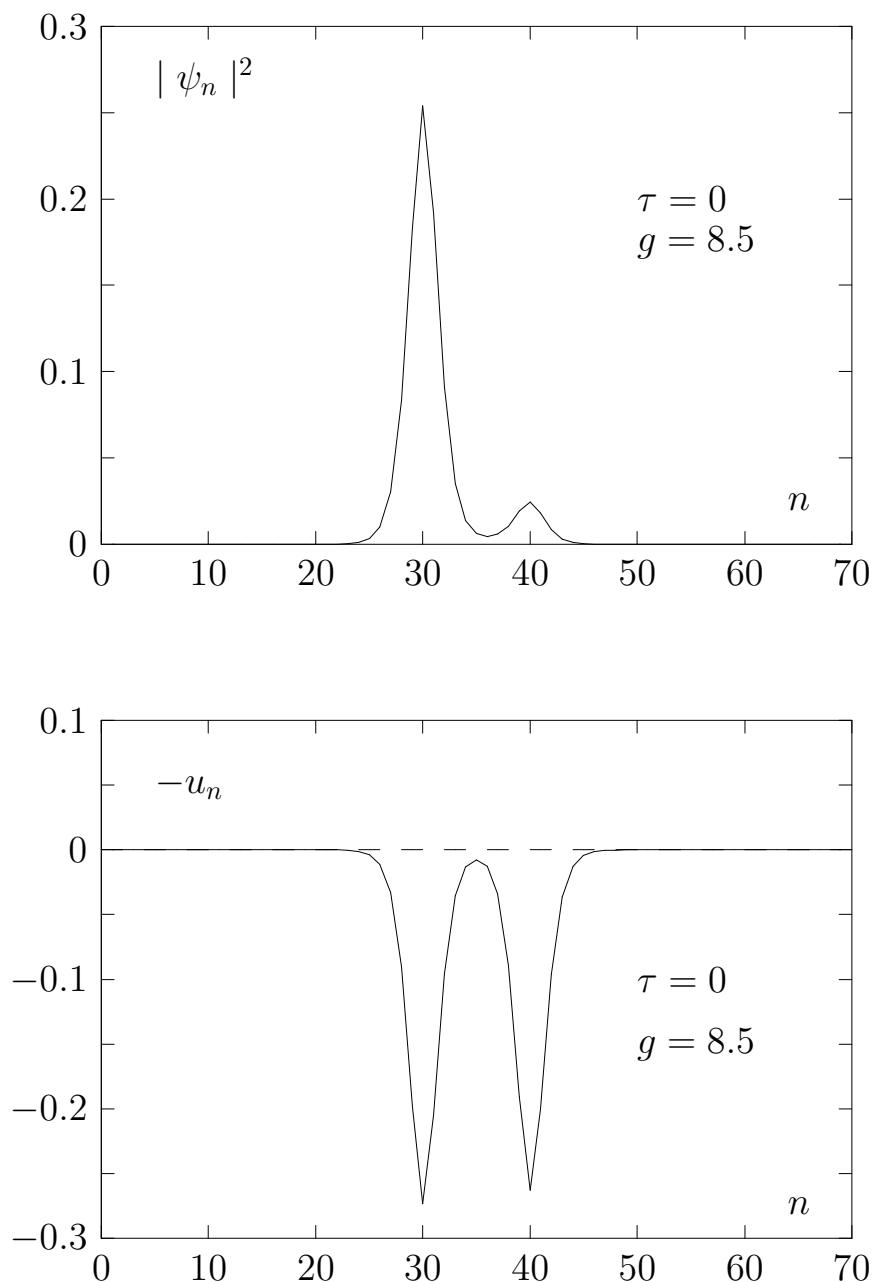


Рис. 1.6. Численное моделирование двухгорбого солитона при сильном ангармонизме:  $\tau = 0$

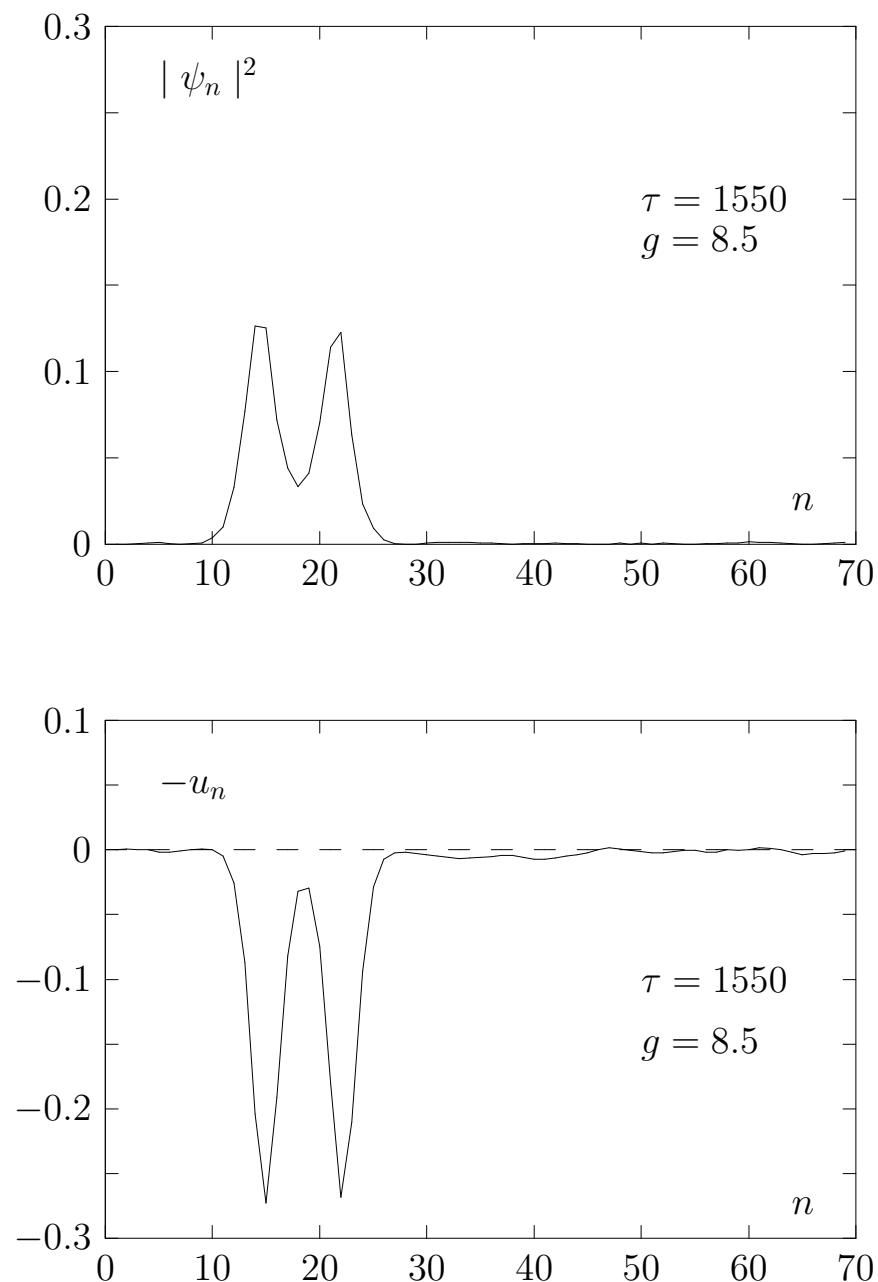


Рис. 1.7. Численное моделирование двухгорбого солитона при сильном ангармонизме:  $\tau = 155$

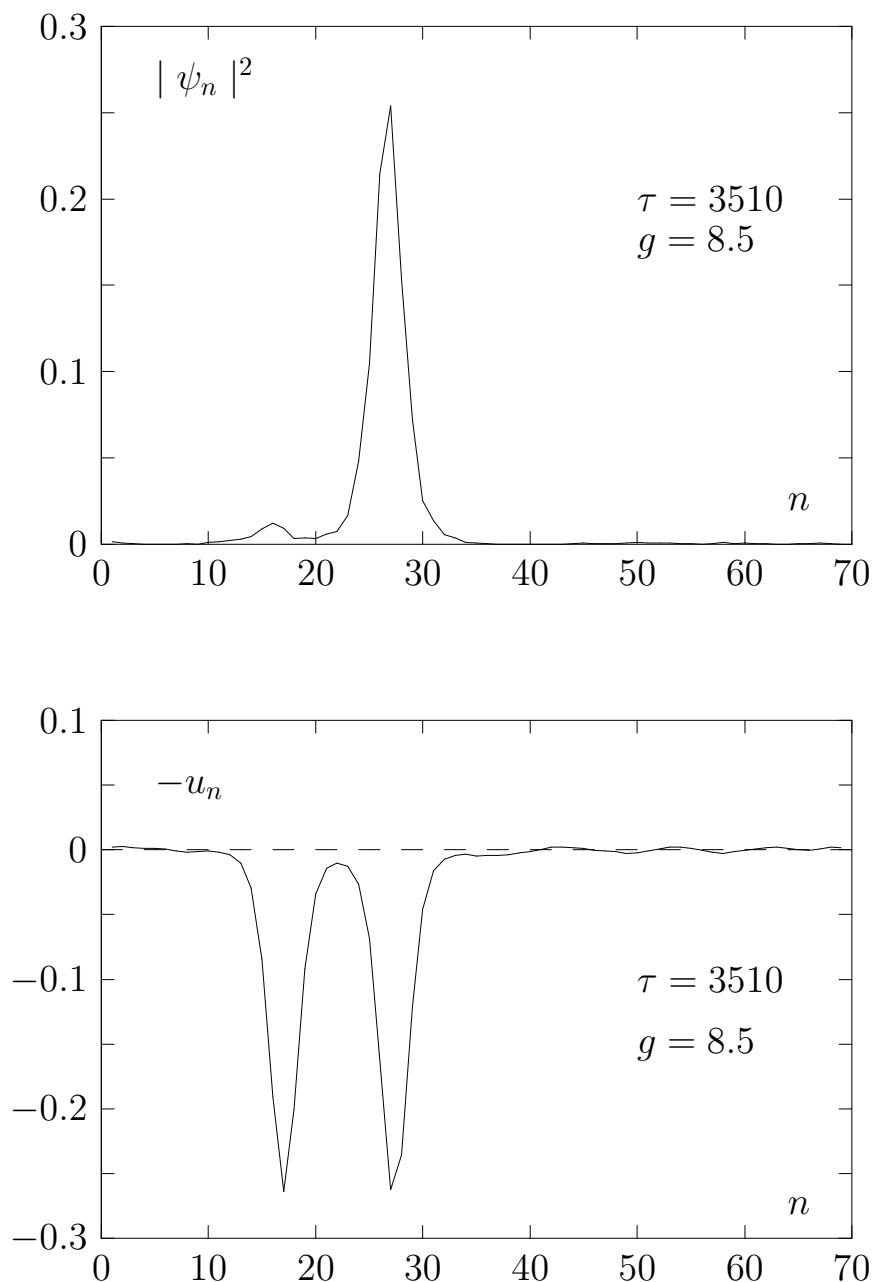


Рис. 1.8. Численное моделирование двухгорбого солитона при сильном ангармонизме:  $\tau = 351$

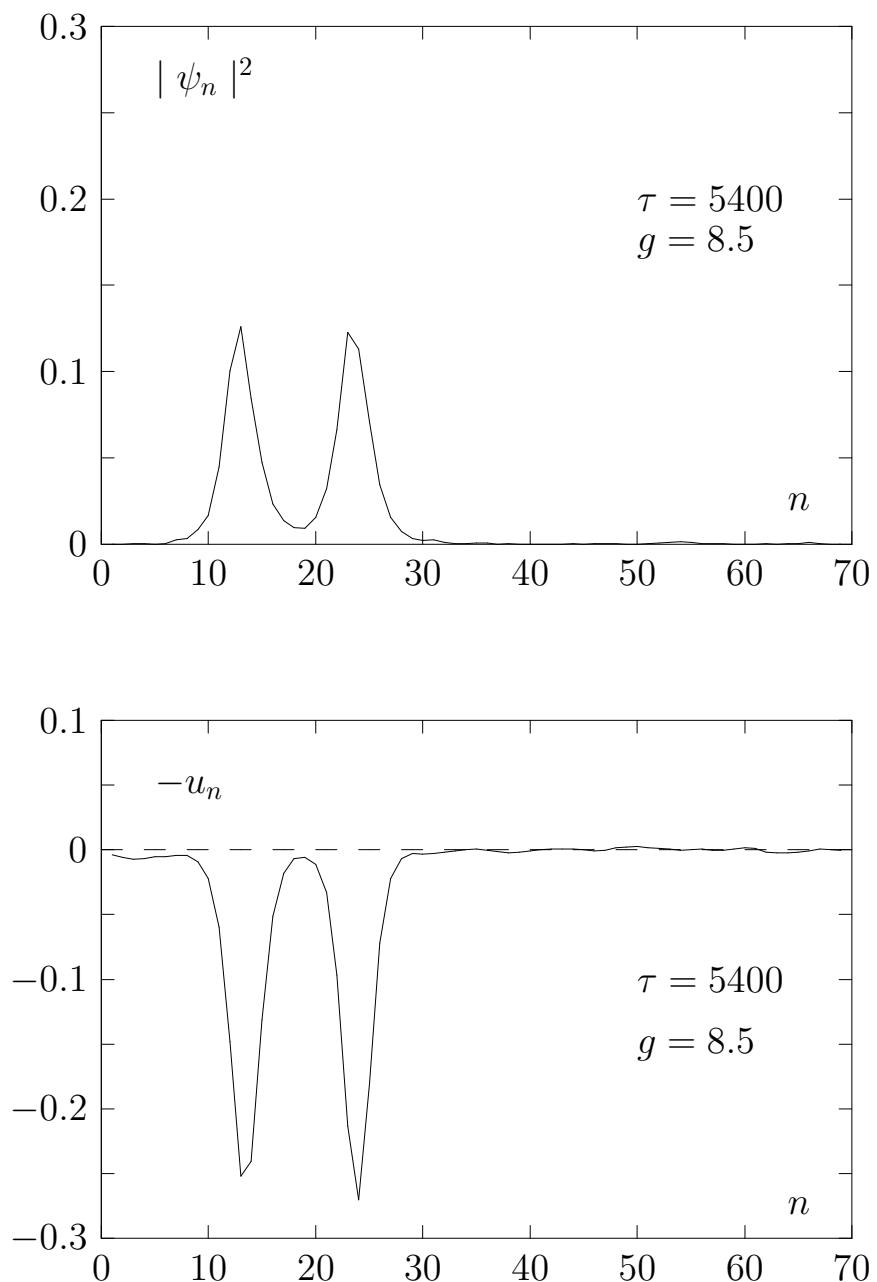


Рис. 1.9. Численное моделирование двухгорбого солитона при сильном ангармонизме:  $\tau = 5400$

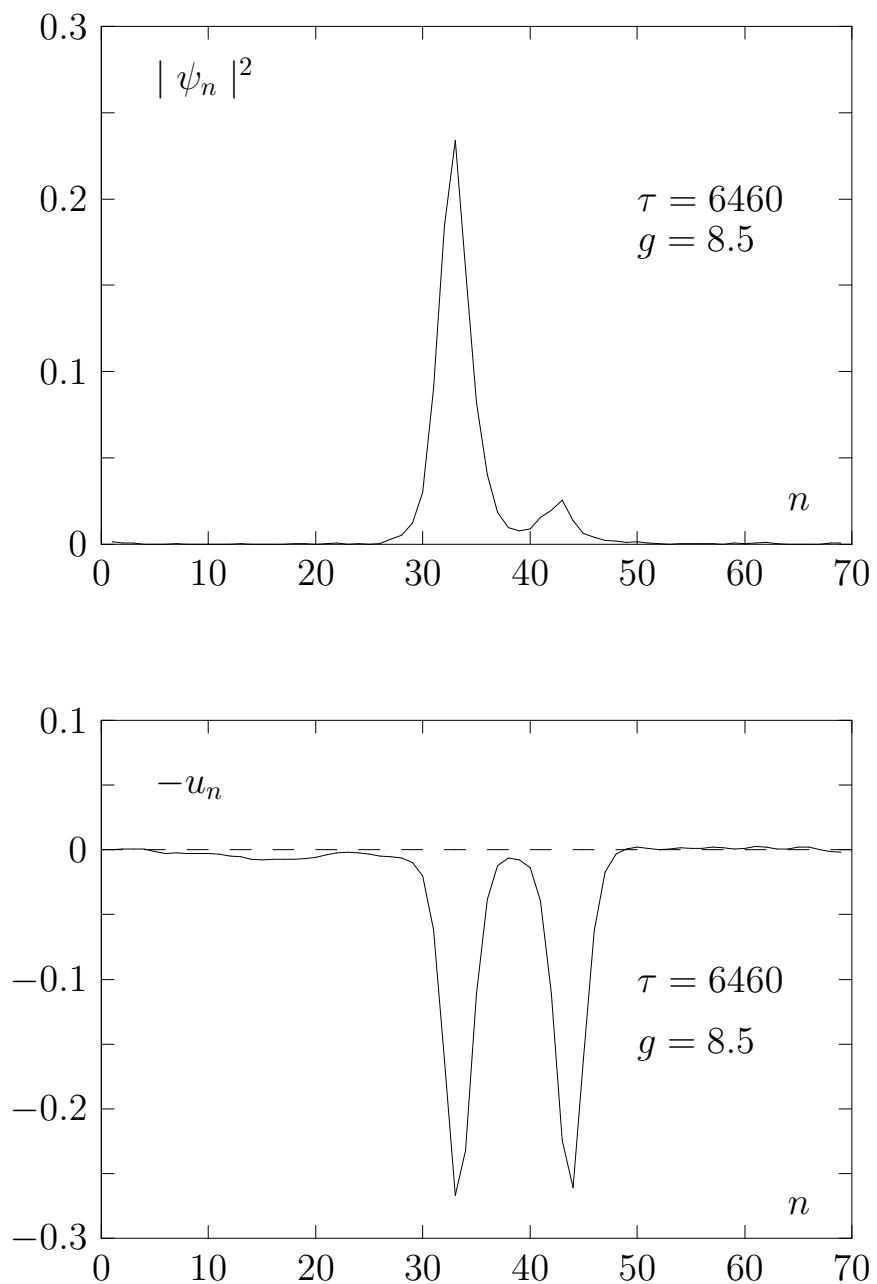


Рис. 1.10. Численное моделирование двугорбого солитона при сильном ангармонизме:  $\tau = 6460$

происходит полное разрушение солитона и делокализация возбуждения, что должно быть наблюдаемо экспериментально.

## 1.7. Заключение

*В один прекрасный день мы достигаем нашей цели — и впредь с гордостью указываем на пройденный нами долгий путь. В действительности мы не замечали, что мы в пути. Нам потому и удалось уйти столь далеко, что мы на каждом месте мнили себя дома.*

*Фридрих Ницше, “Весёлая наука”.*

В этой главе изучался солитонный транспорт энергии (заряда) в *ангармонических* молекулярных цепочках. Показано, что существует критическое значение ангармонизма  $g_{cr} = 6$ , при котором два вида присущих системе солитонов (акустические солитоны и солитоны Давыдова–Золотарюка) *не взаимодействуют* между собой. Весьма вероятно, что континуальный предел системы при этом приводит к вполне интегрируемой задаче. Вариационный подход и прямое численное моделирование демонстрируют существование *связанного состояния* солитона Давыдова–Золотарюка с акустическим в сильноангармонических ( $g > 6$ ) цепочках. В общем случае для этого связанного состояния характерно наличие близероподобных осциляций. При транспорте *заряда* в присутствии внешнего переменного электромагнитного поля, должно возникать резонансное взаимодействие связанного состояния с полем, которое можно было бы наблюдать экспериментально.

Важный вопрос заключается в том, возможно ли вообще в реальных молекулярных цепочках столь большое значение ангармонизма? Чтобы оценить его значение в  $\alpha$ -спиральных белках, мы будем аппроксимировать потенциал водородной связи формулой Леннарда–Джонса

$$V = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{\ell + u_{n+1} - u_n} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{\ell + u_{n+1} - u_n} \right)^6 \right], \quad (1.80)$$

с энергией связи  $\epsilon = 0.23 \text{ eV}$ ,  $\sigma = 4.01 \text{ \AA}$  и постоянной решётки  $\ell = 4.5 \text{ \AA}$ . Легко найти отсюда, что параметр ангармонизма  $\alpha = 2.3 \text{ \AA}^{-1}$ . Поэтому, при обычно принимаемых [10] параметрах  $\alpha$ -спиралей:  $J = 9.7 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$ ,  $\chi = 5.25 \cdot 10^{-11} \text{ Ньютон}$ ,  $M = 1.9 \cdot 10^{-25} \text{ кг}$ , мы найдём, что  $g = 0.8$ , то есть ангармонизм слишком мал. Впрочем, и без того в этих системах максимальная скорость перемещения возбуждения  $v_b = 1400 \text{ м/сек}$  не может превышать скорость звука  $v_0 = 3700 \text{ м/сек}$ , что делает всё наше рассмотрение неактуальным. Столкновения между давыдовскими и акустическими солитонами в этом случае, как показали исследования Переза [56], приводят к постепенному разрушению первых.

Рассмотрим теперь возможность образования связанного состояния акустического солитона с давыдовским *электросолитоном* в тех же  $\alpha$ -спиральных белках. Напомним, что идея Давыдова о возможности существования в белковых молекулах такого носителя заряда, как электросолитон, основывается на том факте, что пептидная группа CONH, имеющая сравнительно большой дипольный момент (около 3.46 Дебая), связывает внешний электрон. При этом константа электрон–фононной связи,  $\chi = \chi_c + \chi_J$ , состоит из двух частей: первая ( $\chi_c$ ) обусловлена кулоновским взаимодействием электрона с статическим дипольным моментом соседних пептидных групп. Оценки показывают [2, 57], что  $\chi_c \simeq -7.5 \cdot 10^{-10} \text{ Ньютон}$ . Отрицательный знак его означает, что данное кулоновское взаимодействие вызывает увеличение расстояния между пептидными группами. Второй член ( $\chi_J = -(dJ/d\ell)$ ) возникает из-за зависимости величины интеграла перекрытия  $J$  от расстояния  $\ell$  между пептидными группами. Как показали Украинский и Мирнов [58], значение  $J = 0.3 \text{ eV}$ . Принимая для  $\chi_J = (2 \div 4)J \text{ ev/\AA}$ , и учитывая найденное ранее значение  $\alpha = 2.3 \text{ \AA}^{-1}$ , мы получаем  $g \geq 12$ . Таким образом, мы приходим к выводу, что в  $\alpha$ –

спиральных белках возможно существования связанного состояния сверхзвукового давыдовского электросолитона с акустическим солитоном.

## Глава 2.

# Нелокальное нелинейное уравнение Шрёдингера

*А скалы кругом всё отвесней,  
А волны — всё круче и злей... .*

*Генрих Гейне.*

### 2.1. Введение

Волны на поверхности глубокой воды и ленгмюровские волны в плазме, световые импульсы в нелинейной оптике и перенос заряда и энергии вдоль полимерных и биологических макромолекул [59, 60], — все эти явления в первом приближении описываются нелинейным уравнением Шрёдингера (НУШ), имеющим вид

$$i\psi_t + \psi_{xx} + |\psi|^2\psi = 0. \quad (2.1)$$

В действительности, это уравнение возникает почти каждый раз при попытке описания эволюции огибающей почти монохроматической волны в какой-либо нелинейной диспергирующей среде и имеет, поэтому, весьма широкую область приложения.

При этом, например, в теории переноса заряда и энергии вдоль цепочки молекул функция  $\psi(x, t)$  является волновой функцией переносимого возбуждения. Нелинейное слагаемое,  $|\psi|^2\psi$ , представляет самодействие

этого возбуждения, обусловленное смещением молекул из положения равновесия в районе, охваченном возбуждением. Наконец, вторая пространственная производная,  $\psi_{xx}$ , описывает дисперсию в длинноволновом приближении эффективной массы [59, 60, 61]. Легко видеть, что в линейном приближении, когда решением этого уравнения являются плоские волны,  $\exp(ikx - i\omega(k)t)$ , закон дисперсии имеет весьма простой вид  $\omega(k) = k^2$ , близкий к реальному закону дисперсии системы только при малых значениях волнового вектора  $k$ , либо, что то же самое, при рассмотрении эволюции широких волновых пакетов. До недавнего времени исследователей вполне удовлетворяла такая простая модель, ибо уже она позволила описать целый ряд таких интереснейших реально наблюдаемых явлений, как неустойчивость Бенджамина–Фейра, существование уединённых пакетов волн, – солитонов, – и упругий характер их взаимодействия, а в двумерном своём обобщении, — самофокусировку оптических импульсов и коллапс ленгмюровских волн . . . [62]. Однако, чем лучше мы понимаем явление, тем точнее стремимся его описать и тем сложнее становится модель, с которой мы работаем. И природа, словно поощряя наше любопытство, среди этой всё возрастающей сложности всё щедрее рассыпает яркие, неожиданные по свой всеобщности, эффекты, за которыми мы, по сути, и охотимся . . .

Вспомните штурмящее море . . . Никогда не надоедающую картину прибоя . . . Гибель волн, набегающих на берег . . . Какая всё же поразительная метаморфоза происходит в них с приближением к берегу: гребень волны начинает постепенно заостряться . . . и вот предельное заострение и почти сразу же, – потеря волной её первоначально симметричной формы, – и она, опрокидываясь, разбивается в бурлящую массу солёной пены . . . А ведь меняется при этом только глубина воды, на языке же математики —

закон дисперсии, который является насыщающимся при больших  $k$  и не может быть аппроксимирован полиномом. Поэтому, для описания явлений заострения и опрокидывания волн мы вынуждены перейти к рассмотрению интегро–дифференциальных уравнений. Подобного рода обобщение уравнения Кортевега – де Вриза (КдВ) было давно уже сделано Уиземом [63, 64]. Однако это произошло ещё во времена всеобщего увлечения *вполне интегрируемыми* уравнениями и потому его начинание не получило в своё время должного развития. К тому же, предложенная им *решаемая* модель была слишком “модельна” для описания поверхностных волн и потому даже самим Уиземом рассматривалась всего лишь как иллюстрация.

Лишь недавно подобное направление исследований продолжилось при изучении роли нелокальных дисперсионных взаимодействий в динамике ангармонической цепочки [65, 66, 67] и в статике, динамике и термодинамике нелинейной модели Клейна–Гордона [68, 69, 70, 71, 72, 73].

В данной главе предложено нелокальное нелинейное уравнение Шрёдингера и изучены основные особенности его солитоноподобных решений. Это уравнение более адекватно, чем обычное НУШ, описывает физические системы, линейный закон дисперсии которых отклоняется от квадратичного при больших  $k$ . Примером может быть, например, перенос внутримолекулярных возбуждений в молекулярных кристаллах [61] и в биополимерах [10], который происходит благодаря резонансному диполь–дипольному взаимодействию, относительно медленно ослабляющемуся с расстоянием. В системах, где дисперсионные кривые двух элементарных возбуждений близки или пересекаются, даже слабая связь между возбуждениями приводит к перемешиванию этих ветвей, в результате чего часто возникают возбуждения с насыщающимся законом дисперсии. Ярким примером такого рода ситуации является возникновение поляритонов при связывании

экситонов и фотонов в полупроводниках и молекулярных кристаллах. В нашем случае, однако, более подходят молекулярные системы с резонансом Ферми в колебательных спектрах, поскольку они описываются рассматриваемым ниже уравнением.

В следующем разделе напоминаются основные свойства солитонных решений обычного НУШ с произвольной степенью нелинейности.

Затем, в разделе 2.3, мы предлагаем новое обобщение НУШ на случай произвольного закона дисперсии линейных волн и начинаем более подробно обсуждать важный частный случай насыщающегося закона дисперсии.

В разделе 2.4 находится неподвижное стационарное солитоноподобное решение нелокального НУШ и обсуждается его метаморфоза при изменении параметра нелокальности. Показано, что форма решения меняется от колоколообразной до заострённой, причём решение обрывается на предельно заострённом солитоне с сингулярной зависимостью по координате.

В разделе 2.5 развивается вариационный подход к исследованию устойчивости найденного решения и полученные выводы сравниваются с результатами численного моделирования. Мы приходим к пониманию, что стационарное решение естественным образом распадается на две ветви, резко отличающиеся характером устойчивости и зависимостью спектрального параметра от нормы.

В разделе 2.6 анализируются свойства движущегося солитона и показывается, аналитически и численно, наличие непертурбативного излучения позади солитона с длиной волны, пропорциональной скорости солитона.

Наконец, в заключительном разделе 2.7 коротко напоминаются и обсуждаются основные результаты главы.

На основании изложенных здесь исследований были сделаны доклады на украинской и зарубежной конференциях [22, 23] и три работы [16, 17, 18].

## 2.2. Напоминание о свойствах обычного НУШ

*Право на новые собственные ценности — откуда возьму я его? Из права всех старых ценностей и границ этих ценностей.*

*Фридрих Ницше, “Злая мудрость”.*

Прежде чем приступить к рассмотрению нелокального НУШ, напомним основные свойства обычного его варианта. При этом, для общности рассмотрения и в связи с большим к нему интересом [74, 75, 76], мы рассмотрим НУШ с произвольной степенью нелинейности

$$i\psi_t + \psi_{xx} + |\psi|^p \psi = 0, \quad (2.2)$$

которое обладает двумя интегралами движения: гамильтонианом

$$H = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ |\partial_x \psi(x, t)|^2 - \frac{2}{p+2} |\psi(x, t)|^{p+2} \right\} dx \quad (2.3)$$

и нормой

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx. \quad (2.4)$$

Оно имеет стационарное солитоноподобное решение вида

$$\psi(x, t) = \left( \frac{p+2}{2} \Lambda \right)^{1/p} \frac{\exp(i\Lambda t)}{\cosh^{2/p}(\sqrt{\Lambda} px/2)}, \quad (2.5)$$

где  $\Lambda$  – спектральный параметр. Значения энергии и нормы этого решения связаны со значением  $\Lambda$  следующими выражениями

$$H_{NLS} = \sigma_p \Lambda^{(4+p)/2p}, \quad N_{NLS} = \nu_p \Lambda^{(4-p)/2p}, \quad (2.6)$$

где

$$\sigma_p = \left( \frac{p+2}{2} \right)^{2/p} \int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \operatorname{sech}^{4/p} \left( \frac{zp}{2} \right) - 2 \operatorname{sech}^{2+4/p} \left( \frac{zp}{2} \right) \right). \quad (2.7)$$

и

$$\nu_p = \left( \frac{p+2}{2} \right)^{2/p} \int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^{4/p} \left( \frac{zp}{2} \right). \quad (2.8)$$

Нетрудно видеть, что энергия солитона отрицательна при  $p < 4$  и положительна при  $p > 4$ . Уже отсюда можно заключить, что в последнем

случае решение не является устойчивым, — уединённому пакету энергетически более выгодно расплыться либо сколлапсировать. Более строгое рассмотрение вопроса устойчивости стационарного решения основывается на теореме Вахитова–Колоколова [78], в соответствии с которой стационарные солитонные решения НУШ с произвольной нелинейностью являются неустойчивыми при  $\frac{dN}{d\Lambda} < 0$  и устойчивыми в противоположном случае.

При этом мы видим, что важной особенностью решения (2.5) является монотонность функций  $N_{NLS}(\Lambda)$  и  $H_{NLS}(\Lambda)$  при любом заданном значении  $p$ . Это означает, что характер устойчивости решения зависит *только* от значения степени нелинейности  $p$ , причём оно устойчиво при  $p < 4$  и неустойчиво при  $p > 4$ . Тот факт, что в случае  $p = 4$ , когда  $\frac{dN_{NLS}}{d\Lambda} = 0$ , решение также является неустойчивым, доказывается с использованием более тонких методов [75]. Численные расчёты и различные аналитические подходы показывают, что при  $p \geq 4$  решение либо коллапсирует, либо расплывается [74, 77]. Итак, основной вывод, к которому мы приходим, заключается в том, что стационарные решения обычного НУШ существуют при *произвольном положительном* значении нормы  $N$  и являются устойчивыми при  $p < 4$ , *независимо* от значения  $N$ . Оба эти свойства утрачиваются стационарными решениями нелокального НУШ, к рассмотрению которого мы и приступаем.

### 2.3. Уравнение движения

*Много ли есть людей, которые, любуясь игрой волн на поверхности ручейка, думают, как найти уравнения, по которым можно было бы вычислить форму любого волнового гребня?*

*Людвиг Больцман.*

Обобщим рассмотренное в предыдущем разделе НУШ на случай про-

извольного закона дисперсии линейных волн

$$i\psi_t + \int_{-\infty}^{\infty} J(x-y) (\psi(y,t) - \psi(x,t)) dy + |\psi|^p \psi = 0. \quad (2.9)$$

Поскольку это уравнение включает в себя интегрирование по всем значениям пространственной переменной с ядром нелокальности  $J(x-y)$ , мы будем называть его *нелокальным нелинейным уравнением Шредингера*. В качестве модельного ядра нелокальности, приводящего к насыщающемуся закону дисперсии удобно выбрать функцию Кек–Бейкера [79, 80]

$$J(x-y) = \frac{\alpha^3}{2} \exp(-\alpha|x-y|). \quad (2.10)$$

Нетрудно убедиться, что при таком выборе ядра уравнение (2.9), в пределе  $\alpha \rightarrow \infty$ , переходит в уже рассмотренное выше обычное НУШ (2.2), что позволит нам в дальнейшем легко сравнивать их свойства.

Как и (2.2) уравнение (2.9) сохраняет гамильтониан

$$H = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} J(x-y) (|\psi(x,t)|^2 - \psi^*(x,t)\psi(y,t)) dy - \frac{2}{p+2} |\psi(x,t)|^{p+2} \right\} dx \quad (2.11)$$

и норму

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x,t)|^2. \quad (2.12)$$

Ядро (2.10) является функцией Грина для оператора  $(\partial_x^2 - \alpha^2)$

$$(\partial_x^2 - \alpha^2) J(x) = -\alpha^4 \delta(x), \quad (2.13)$$

что позволяет нам переписать уравнение (2.9) в форме

$$i \partial_t \psi + \frac{\alpha^2 \partial_x^2}{\alpha^2 - \partial_x^2} \psi + |\psi|^p \psi = 0. \quad (2.14)$$

Линейной части этого уравнения соответствует закон дисперсии  $\omega(k) = \frac{\alpha^2 k^2}{\alpha^2 + k^2}$ . С одной стороны, такой *насыщающийся* при больших  $k$  закон дисперсии характерен для систем с резонансом Ферми или с перемешиванием

близких оптической и акустической дисперсионных ветвей. С другой стороны, и это весьма примечательно, в интервале  $k \in [0, \pi]$  он близок (с точностью 2 %) при  $\alpha = 1.685$  к закону дисперсии  $\omega_d(k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3}(1 - \cos(kn))$  возбуждения в молекулярной давыдовской цепочке с резонансным диполь–дипольным взаимодействием (см. рис. 2.1). Таким образом, мы приходим к обобщению модели Давыдова [1, 2], выходя за рамки приближения ближайших соседей, использовавшегося в предыдущей главе. Однако теперь мы не учитываем нелинейность, связанную с ангармонизмом цепочки.

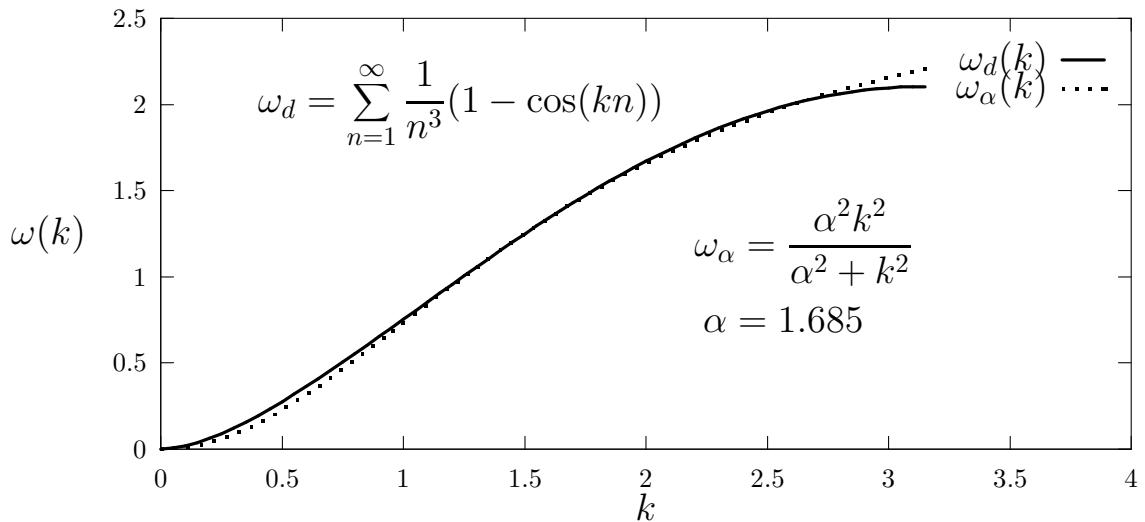


Рис. 2.1. Сравнение модельного закона дисперсии с присущим молекулярной цепочке с диполь–дипольным взаимодействием.

Легко видеть, что когда радиус нелокального взаимодействия мал в сравнении с шириной локализации возбуждения (т.е.  $\alpha \gg 1$ ), уравнение (2.14) переходит в обычное уравнение Шрёдингера (2.2). Но если эти два масштаба длины имеют один порядок, то эффекты нелокальности становятся важны и необходимо рассматривать непосредственно уравнение (2.14). При этом удобно избавиться от явной зависимости от параметра нелокальности,  $\alpha$ , сделав масштабное преобразование переменных

$$z = \alpha x, \quad \tau = \alpha^2 t, \quad \phi(z, \tau) = \alpha^{-2/p} \psi(x, t). \quad (2.15)$$

В терминах новых переменных гамильтониан (2.11), норма (2.12) и уравнение движения (2.14) примут вид

$$\mathcal{H} \equiv - \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \phi^* \frac{\partial_z^2}{1 - \partial_z^2} \phi + \frac{2}{p+2} |\phi|^{p+2} \right\} dz = \alpha^{-(p+4)/p} H , \quad (2.16)$$

$$\mathcal{N} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(z, \tau)|^2 dz = \alpha^{(p-4)/p} N , \quad (2.17)$$

$$i \partial_\tau \phi + \frac{\partial_z^2}{1 - \partial_z^2} \phi + |\phi|^p \phi = 0 . \quad (2.18)$$

## 2.4. Неподвижные стационарные солитонные решения

Мы будем искать неподвижное стационарное солитонное решение уравнения (2.18) в виде

$$\phi(z, \tau) = \left( \frac{b^2}{b^2 - 1} \right)^{1/p} F(z, b) \exp(i\Lambda\tau) , \quad (2.19)$$

где  $\Lambda$  – спектральный параметр, а  $b = \sqrt{1 + \Lambda^{-1}}$ . Подставляя решение (2.19) в уравнение (2.18) и умножая последнее на оператор  $(1 - \partial_z^2)$ , мы получим уравнение на функцию  $F(z, b)$

$$\frac{d^2}{dz^2} (F - F^{p+1}) - F b^{-2} + F^{p+1} = 0 . \quad (2.20)$$

Подобное уравнение (с  $p = 1$ ) рассматривалось в работе [67] при изучении особенностей солитонной динамики в ангармонических цепочках, связанных с учётом нелокальных межмолекулярных взаимодействий. Интересно отметить, что уравнение (2.20) может быть получено путём минимизации действия

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} (T - U) dz \quad (2.21)$$

некоторой механической системы с одной степенью свободы, кинетическая энергия которой равна

$$T = \frac{b}{2} (1 - (p+1)F^p)^2 \left( \frac{dF}{dz} \right)^2 , \quad (2.22)$$

а потенциальная энергия имеет вид

$$U = -\frac{b}{2} F^2 (F^p - F_1^p) (F^p - F_2^p), \quad (2.23)$$

где

$$F_{1,2}^p = \frac{1}{b^2(p+2)} \cdot \left( b^2 + p + 1 \mp \sqrt{(b^2 - (p+1)^2)(b^2 - 1)} \right). \quad (2.24)$$

Как видно из этих выражений, уравнение (2.20) описывает движение частицы с переменной массой в потенциале с двумя максимумами и одним минимумом (в области положительных значений  $F$ ).

При нулевых граничных условиях  $F(\pm\infty, b) = 0$ , уравнение (2.20) имеет решение

$$\exp\left(\frac{pz}{b}\right) = \frac{F_1^{p/2} + F_2^{p/2} \mu}{F_1^{p/2} - F_2^{p/2} \mu} \left(\frac{1-\mu}{1+\mu}\right)^{(p+1)/b}, \quad (2.25)$$

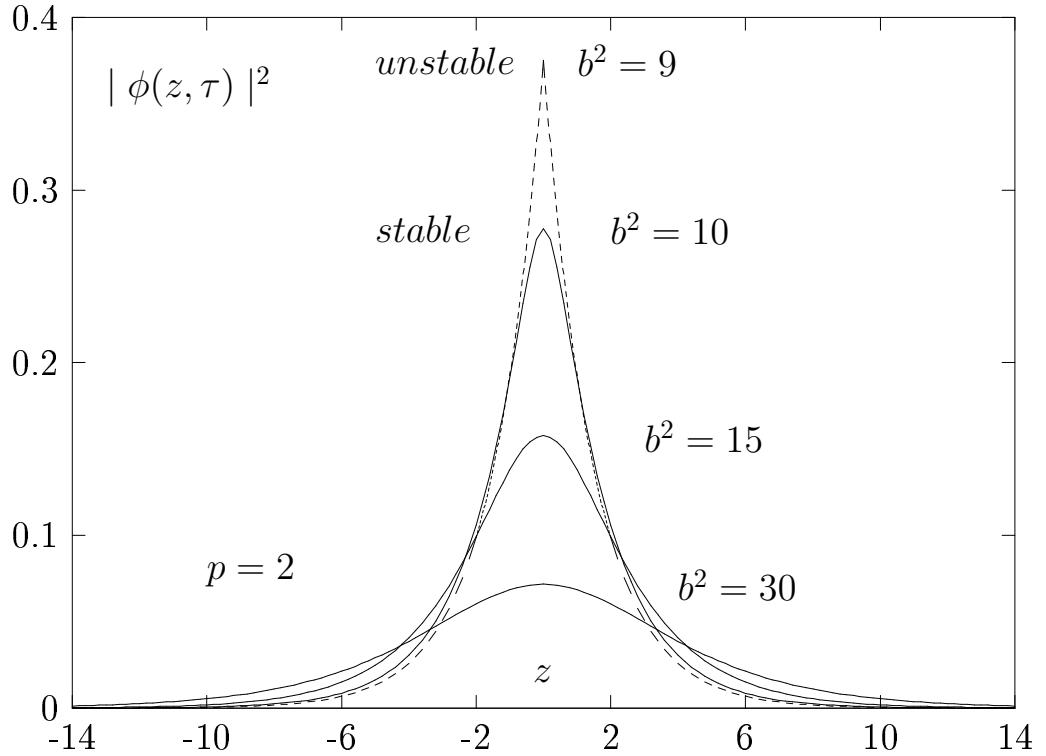
где

$$\mu = \left(\frac{F_1^p - F^p}{F_2^p - F^p}\right)^{1/2}. \quad (2.26)$$

Нетрудно видеть, что это решение существует только при  $b > (p+1)$ , то есть при  $\Lambda < ((p+1)^2 - 1)^{-1}$ . На рисунках 2.2 и 2.3 изображена форма этого решения при различных значения спектрального параметра  $b$  для  $p = 2$  и  $p = 3$ , соответственно.

При  $b \gg (p+1)$  это решение имеет колоколообразный вид  $F(z, b) = [(p+2)/2b^2]^{1/p} \operatorname{sech}^{2/p}(pz/2b)$  и полностью совпадает со стационарным решением (2.5) обычного НУШ. Это естественный результат, поскольку неравенство  $b \gg (p+1)$  означает, что ширина солитона велика и, таким образом, эффекты, связанные с наличием нелокальности оказываются несущественными.

При произвольных значениях  $b$  асимптотическое поведение решения (2.25)–(2.26) имеет вид

Рис. 2.2. Солитонное решение (2.25)–(2.26) для  $p = 2$ 

**Для “крыльев” ( $|z| \gg 1$ )**

$$F(z, b) = F_1 F_2 \left( \frac{4}{F_2^p - F_1^p} \right)^{1/p} \cdot \left( \frac{F_2^{p/2} - F_1^{p/2}}{F_2^{p/2} + F_1^{p/2}} \right)^{(p+1)/pb} \exp(-|z|/b) , \quad (2.27)$$

**Вблизи максимума ( $|z| \ll 1$ )**

$$F(z, b) = F_1 \operatorname{sech}^{2/p}(kz) , \quad (2.28)$$

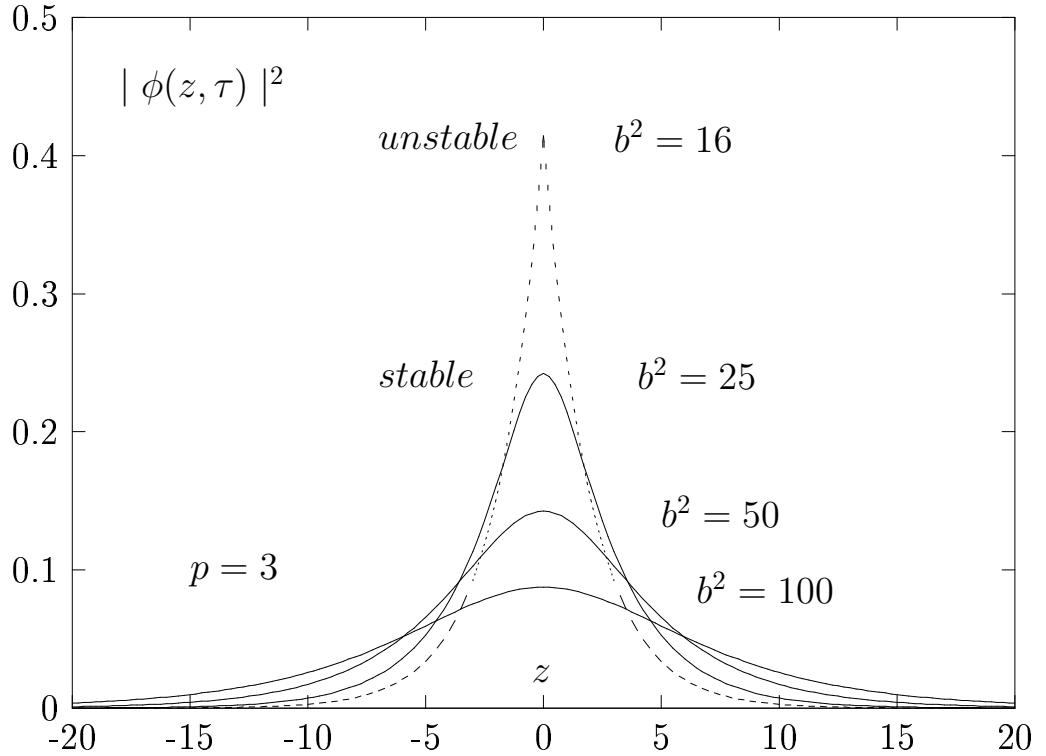
где

$$k = \frac{p}{2b} \left\{ 1 - \frac{p+1}{b} \left( \frac{F_1}{F_2} \right)^{p/2} \right\}^{-1} . \quad (2.29)$$

Как видно из последней формулы, при  $b^2 = (p+1)^2 + \gamma$

$$k \simeq \sqrt{\frac{p+2}{4p} \cdot \frac{1}{\gamma}} , \quad (2.30)$$

и, таким образом, вершина солитона становится очень острой при малых  $\gamma$ . Наконец, при  $b = (p+1)$  корни  $F_1$  и  $F_2$  потенциала (2.23) совпадают

Рис. 2.3. Солитонное решение (2.25)–(2.26) для  $p = 3$ 

( $F_1 = F_2 = (p+1)^{-1/p}$ ) и когда частица, описываемая действием  $S$ , приближается к  $F_1$ , её масса уменьшается до нуля (см. (2.22)). В результате вместо плавного решения мы получаем заострённый солитон вида

$$\phi(z, \tau) = \left( \frac{p+1}{(p+1)^2 - 1} \right)^{1/p} \exp \left( \frac{i\tau}{(p+1)^2 - 1} - \frac{|z|}{p+1} \right), \quad (2.31)$$

с энергией

$$\mathcal{H}_{cusp} = \frac{p+1}{(p+2)^2} \left( 1 - \frac{4(p+1)}{(p+1)^2 - 1} \right) \left( \frac{p+1}{(p+1)^2 - 1} \right)^{2/p} \quad (2.32)$$

и нормой

$$\mathcal{N}_{cusp} = (p+1) \left( \frac{p+1}{(p+1)^2 - 1} \right)^{2/p}. \quad (2.33)$$

Впервые решения с подобной сингулярной зависимостью по координате были получены в теории волн на мелкой воде Уиземом [63, 64]. Недавно же

они вызвали повышенный интерес как решения предложенного Камассой и Холмом для той же теории нового вполне интегрируемого уравнения [81]. Поэтому интересный в любой ситуации, вопрос устойчивости найденных решений становится вдвойне интересным в отношении заострённого солитона с сингулярной зависимостью по координате. В следующем разделе мы постараемся ответить на этот вопрос.

## 2.5. Устойчивость неподвижного солитона

*Находить все вещи глубокими — это неудобное свойство: оно вынуждает постоянно напрягать глаза и в конце концов всегда находить больше, чем того желали.*

*Фридрих Ницше, “Весёлая наука”.*

Приступая к исследованию устойчивости стационарных солитонных решений, нельзя не отметить тот удивительный по своей всеобщности факт, что во *всех вариантах* континуального и дискретного нелинейного уравнения Шрёдингера устойчивость солитона однозначно связана с характером зависимости спектрального параметра,  $\Lambda$ , солитона от его нормы. Действительно, существует целый ряд частных теорем и численных расчётов [75, 78, 103], доказывающих один и тот же критерий: именно, что все стационарные решения вида  $\psi(x, t) = \phi(x, \Lambda) \exp(i\Lambda t)$ , для которых  $\frac{d}{d\Lambda} \int |\phi(x, \Lambda)|^2 dx < 0$ , являются неустойчивыми. Поэтому, разумеется, мы не можем сейчас не обратить внимания на зависимость  $\mathcal{N}(\Lambda)$  в *нашем* случае.

Её можно найти аналитически точно в случае  $p = 2$ . Подставляя решение (2.25)–(2.26) в уравнения (2.17)–(2.16) мы приходим к выражению для нормы,  $\mathcal{N}$ , и гамильтониана,  $\mathcal{H}$

$$\mathcal{N}(b) = \frac{1}{b^2 - 1} \left( 3b + \frac{b^2 - 9}{8} \ln \frac{b^2 + 4b + 3}{b^2 - 4b + 3} \right), \quad (2.34)$$

$$\mathcal{H}(b) = \frac{b^3}{4(b^2 - 1)^2} - \frac{b^2 + 7}{b^2 - 1} \cdot \frac{\mathcal{N}(b)}{16}. \quad (2.35)$$

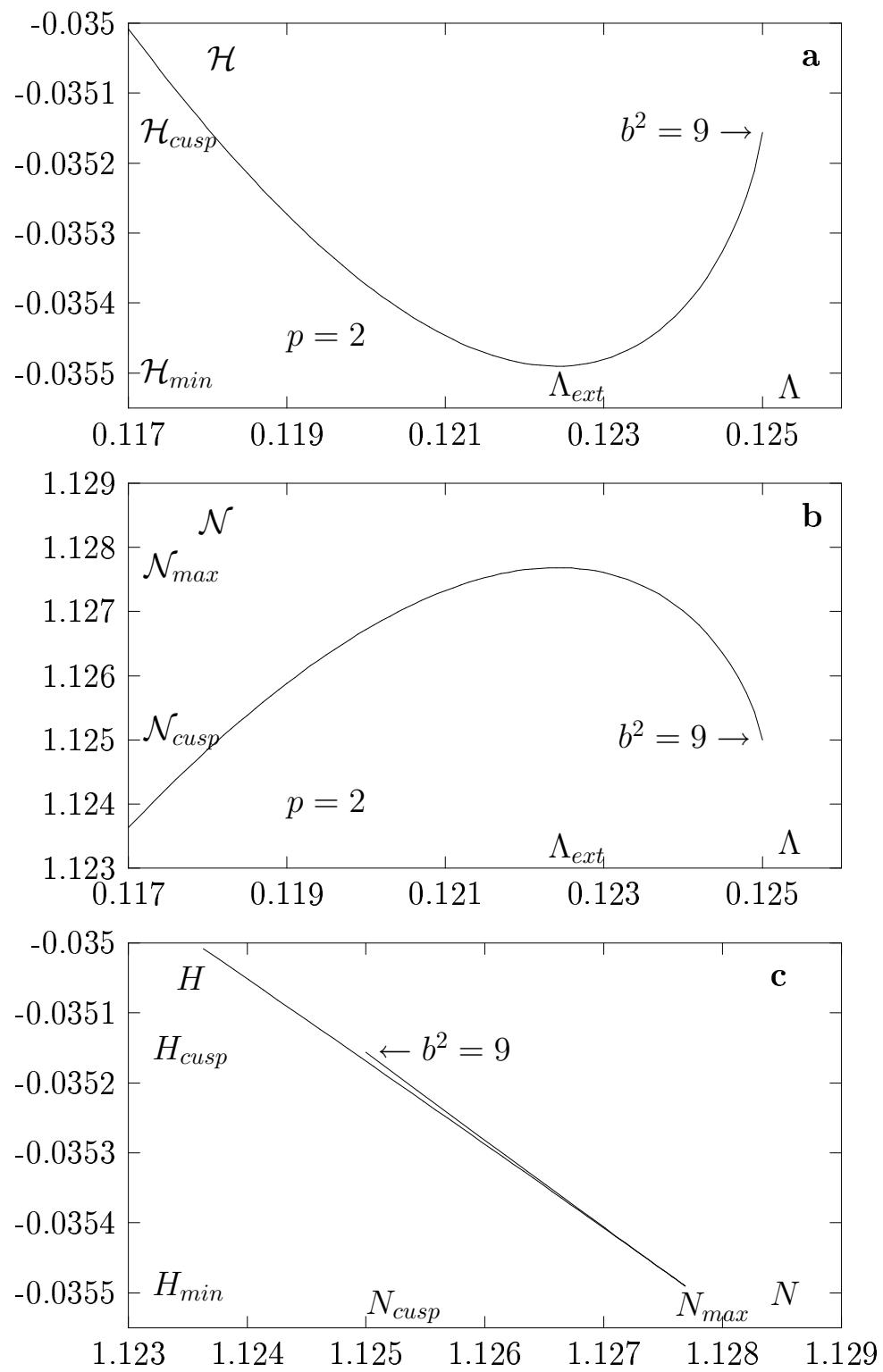
Можно видеть, что первые производные  $\mathcal{H}$  и  $\mathcal{N}$  по  $\Lambda$  имеют противоположные знаки

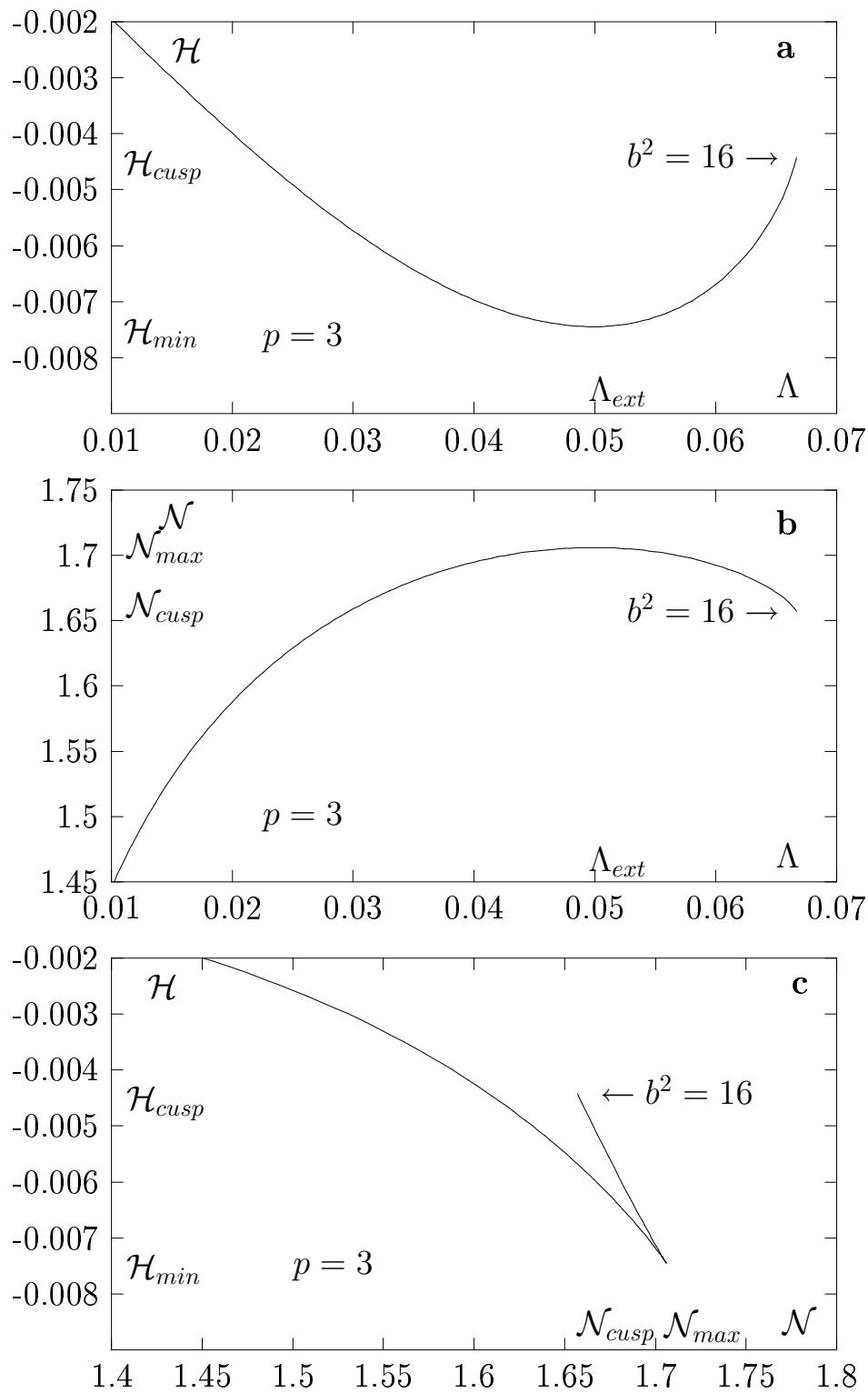
$$\frac{d\mathcal{H}}{d\Lambda} = -\Lambda \frac{d\mathcal{N}}{d\Lambda} \quad (2.36)$$

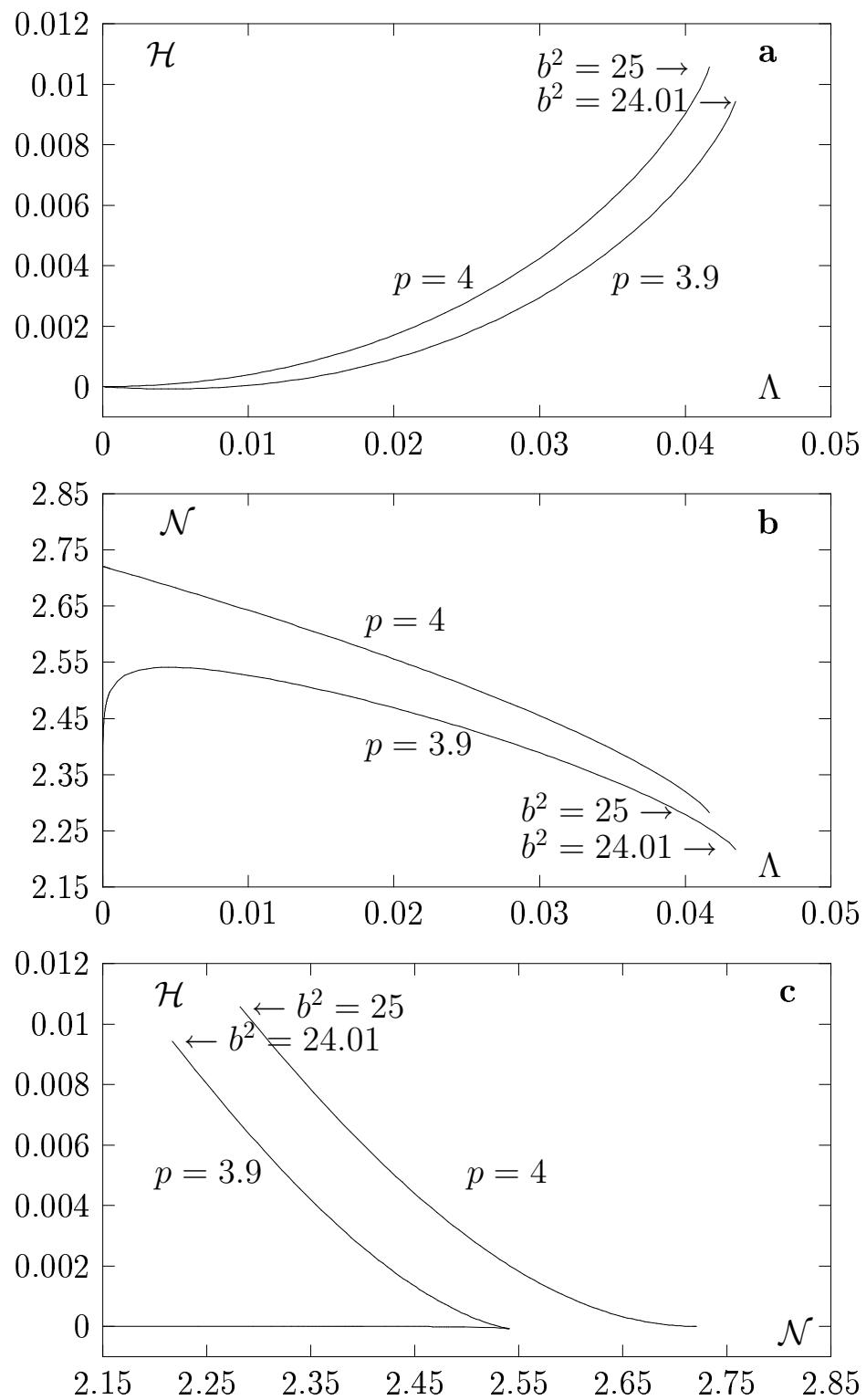
и значит их экстремумы находятся в одной и той же точке. Рисунки 2.4a–2.4b показывают зависимость гамильтониана,  $\mathcal{H}$ , и нормы,  $\mathcal{N}$ , солитонного решения от спектрального параметра,  $\Lambda$ . Из рис. 2.4b видно, что стационарное решение существует только при  $\mathcal{N} \leq \mathcal{N}_{max} \simeq 1.127685$  и что по мере заострения солитона (увеличения  $\Lambda$ ) рост  $\mathcal{N}(\Lambda)$  сменяется убыванием. На рисунках 2.5–2.7 представлены те же зависимости и для других значений  $p$ . Легко видеть, что при любом  $p < 4$  их вид качественно совпадает с имеющим место для случая  $p = 2$ .

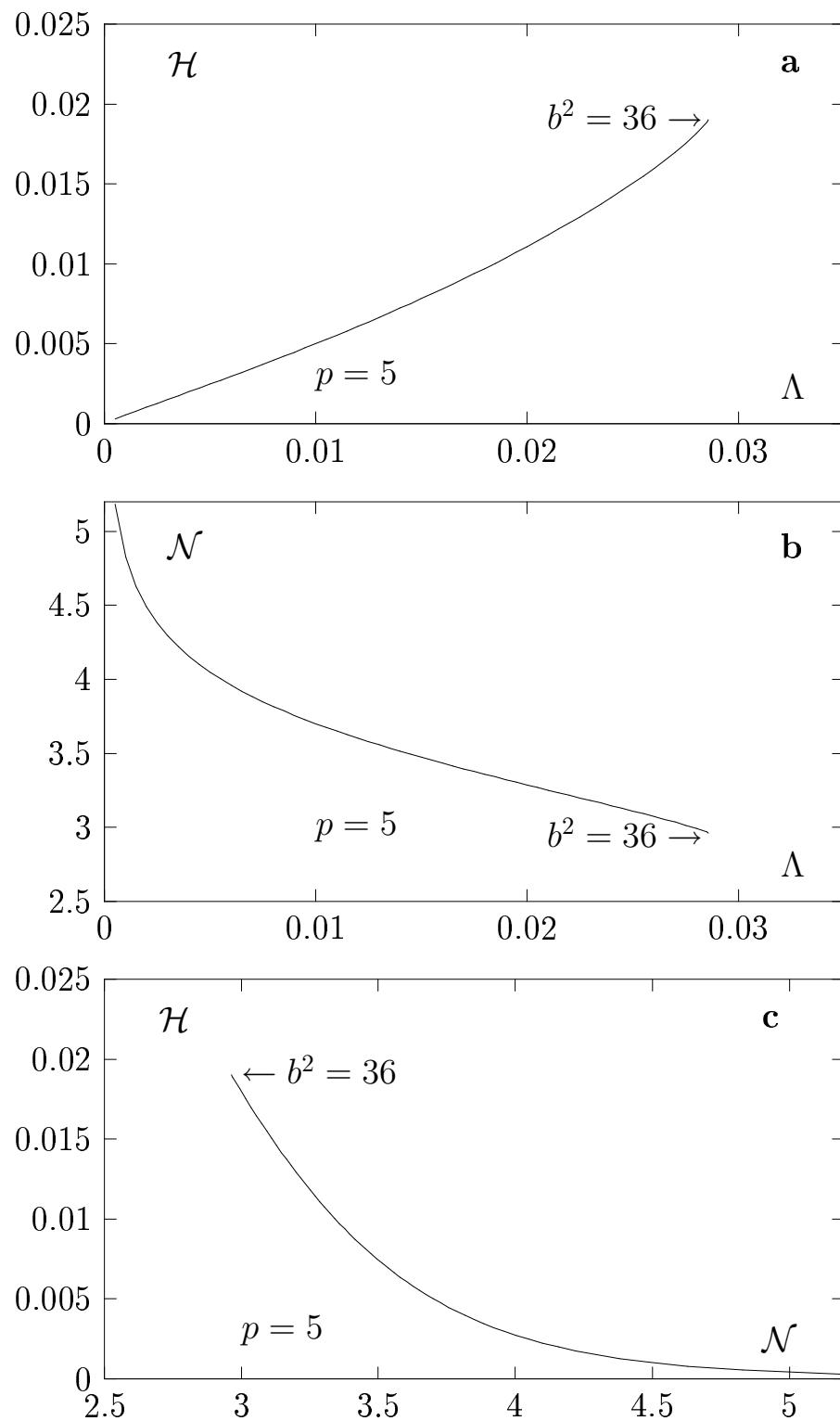
Общим для всех  $p < 4$  является то, что, в отличие от обычного НУШ, область существования стационарного решения ограничена сверху значением  $\mathcal{N}_{max}$ . Численные расчёты показывают, что при  $\mathcal{N} \geq \mathcal{N}_{max}$  любое достаточно сильно локализованное вначале распределение коллапсирует за конечное время. Таким образом, в отличие от обычного НУШ, коллапс волновой функции становится возможным даже при  $p < 4$ , то есть и для физически наиболее важного случая  $p = 2$ , если только норма волновой функции выбрана достаточно большой.

Когда же норма  $\mathcal{N}$  изменяется в интервале  $[\mathcal{N}_{crest}, \mathcal{N}_{max}]$ , имеются два значения спектрального параметра,  $\Lambda$ , соответствующих каждому данному значению  $\mathcal{N}$ . Другими словами, в этом интервале имеется две ветви стационарных солитонных решений. Первая ветвь, для которой  $\frac{d\mathcal{N}}{d\Lambda} > 0$ , существует для всех положительных  $\mathcal{N} \leq \mathcal{N}_{max}$ . Вторая же ветвь, с  $\frac{d\mathcal{N}}{d\Lambda} < 0$ , существует лишь в интервале  $\mathcal{N}_{crest} \leq \mathcal{N} \leq \mathcal{N}_{max}$ .

Рис. 2.4. Диаграмма стационарного решения для  $p = 2$

Рис. 2.5. Диаграмма стационарного решения для  $p = 3$

Рис. 2.6. Диаграмма стационарного решения для  $p = 3.9$  и  $p = 4$

Рис. 2.7. Диаграмма стационарного решения для  $p = 5$

На рис. 2.4с–2.6с представлена зависимость гамильтониана,  $\mathcal{H}$ , от нормы,  $\mathcal{N}$ , для  $p < 4$ . Видно, что функция  $\mathcal{H}(\mathcal{N})$  имеет особенность в виде точки возврата, которая заставляет, и, возможно [75], небезосновательно, вспомнить о теории катастроф. Уже из энергетических соображений кажется наиболее вероятным, что первая, низкоэнергетическая, ветвь кри-вой  $\mathcal{H}(\mathcal{N})$  соответствует устойчивому солитону, а вторая, высокоэнергетическая, — неустойчивому. Как уже отмечалось, это действительно так для случая обычного НУШ с произвольным характером нелинейности, для которого доказана теорема Вахитова–Колоколова [78] о том, что ветвь с  $\frac{d\mathcal{N}}{d\Lambda} < 0$  (то есть именно высокоэнергетическая) является неустойчивой. Однако, чтобы твёрдо и с чистой совестью опираться на этот критерий и в нашем случае, нам необходимо ещё как можно более жёстко испытать его живучесть и в нелокальных уравнениях. Мы можем проделать это аналитически до конца лишь в случае  $p = 2$ , когда берутся явно все необходимые интегралы. Тем не менее, приводимое ниже доказательство остаётся справедливым и при других значениях  $p$ , хотя и утрачивает всё своё изящество из-за необходимости численного взятия интегралов.

Итак, пусть  $p = 2$ . Наше доказательство критерия устойчивости решения будет опираться на включающий времененную динамику системы вариационный метод. Рассмотрим ограниченный класс функций  $\phi(z, \tau) = \phi_v(z, \tau)$ , где  $\phi_v(z, \tau)$  включает в себя стационарные солитонные решения (2.19). Если мы докажем, что (2.19) является неустойчивым даже в рамках этого ограниченного класса функций  $\phi_v(z, \tau)$ , мы сможем утверждать, что оно неустойчиво также и на классе вообще всех допустимых функций. Выберем в качестве пробной функции

$$\phi_v(z, \tau) = \exp(i\Lambda\tau + i\sigma z^2) \sqrt{\frac{\beta^2}{\beta^2 - 1} \cdot \frac{\mathcal{N}(b)}{\mathcal{N}(\beta)}} \cdot F(z, \beta), \quad (2.37)$$

где  $\sigma(\tau)$  и  $\beta(\tau)$  являются действительными временезависящими вариаци-

онными параметрами, а  $b^2 = 1 + \Lambda^{-1}$ . Функции  $F(z, \beta)$  и  $\mathcal{N}(\beta)$  определены уравнениями (2.25)–(2.26) и (2.34), соответственно. Функция (2.37) совпадает со стационарным решением (2.19) при

$$\sigma = 0 \quad \text{and} \quad \beta = b . \quad (2.38)$$

Лагранжиан, соответствующий уравнению (2.18) имеет вид

$$\mathcal{L}(\phi, \phi_\tau) = \frac{i}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dz (\phi^* \phi_\tau - \phi_\tau^* \phi) - \mathcal{H}(\phi) , \quad (2.39)$$

а гамильтониан  $\mathcal{H}$  определён уравнением (2.16). Подставляя (2.37) в (2.39), мы получаем эффективный лагранжиан

$$\mathcal{L}(\sigma, \sigma_\tau, \beta) = -\sigma_\tau \cdot Q(\beta) - \mathcal{E}(\sigma, \beta) , \quad (2.40)$$

где введены функция

$$Q(\beta) = \frac{\beta^2}{\beta^2 - 1} \cdot \frac{\mathcal{N}(b)}{\mathcal{N}(\beta)} \int_{-\infty}^{\infty} F^2(z, \beta) z^2 dz , \quad (2.41)$$

и эффективный гамильтониан

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\sigma, \beta) = & - \frac{1}{2} \iint_{-\infty}^{\infty} dx dy e^{-|x-y|} \left\{ |\phi_v(x)| \cdot |\phi_v(y)| \cos(\sigma(x^2 - y^2)) \right. \\ & \left. - |\phi_v(x)|^2 \right\} - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\phi_v(x)|^4 . \end{aligned} \quad (2.42)$$

Вариационные уравнения движения, соответствующие эффективному лагранжиану (2.40), запишутся как

$$\beta_\tau \frac{dQ}{d\beta^2} - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \sigma} = 0 , \quad \sigma_\tau \frac{dQ}{d\beta^2} + \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \beta^2} = 0 . \quad (2.43)$$

Рассматривая малые отклонения этих уравнений от стационарного решения (2.38), мы найдём из (2.42), что

$$\left( \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial \sigma \partial \beta^2} \right)_{\substack{\sigma=0 \\ \beta=b}} = 0 , \quad (2.44)$$

равно нулю, а

$$\left( \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial \sigma^2} \right)_{\substack{\sigma=0 \\ \beta=b}} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy e^{-|x-y|} (x^2 - y^2)^2 \cdot |\phi_v(x)| \cdot |\phi_v(y)| > 0 , \quad (2.45)$$

всегда положительно. Кроме того, мы можем найти явную зависимость эффективного гамильтониана от  $\beta$

$$\mathcal{E}(\sigma = 0, \beta) = \frac{\mathcal{N}(b)}{\mathcal{N}(\beta)} \cdot \left( 1 - \frac{1}{2} \frac{\mathcal{N}(b)}{\mathcal{N}(\beta)} \right) \cdot \left( \frac{\beta^3}{2(\beta^2 - 1)^2} - \frac{\beta^2 - 9}{\beta^2 - 1} \frac{\mathcal{N}(\beta)}{8} \right) - \frac{\mathcal{N}(b)}{\beta^2 - 1} . \quad (2.46)$$

Его вторая производная по  $\beta^2$  имеет знак, совпадающий со знаком первой производной  $\mathcal{N}$  по  $\Lambda$ . Действительно

$$\left( \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial (\beta^2)^2} \right)_{\substack{\sigma=0 \\ \beta=b}} = A(b) \cdot \frac{\partial \mathcal{N}}{\partial \Lambda} , \quad (2.47)$$

где

$$A(b) = \frac{b(b^4 + 10b^2 - 27) \ln \left( \frac{b^2 + 4b + 3}{b^2 - 4b + 3} \right) - 8b^2(b^2 - 9)}{32\mathcal{N}^2(b^2 - 1)^2} \quad (2.48)$$

положительно при всех  $b \geq 3$ . Когда  $\sigma$  мало и  $\beta$  близко к  $b$ , уравнение (2.43) принимает вид

$$\sigma_{\tau\tau} + \Omega^2 \sigma = 0 , \quad (\beta^2 - b^2)_{\tau\tau} + \Omega^2 (\beta^2 - b^2) = 0 , \quad (2.49)$$

где

$$\Omega^2 = \left( \frac{dQ}{d\beta^2} \right)_{\beta=b}^{-2} \cdot \left( \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial \sigma^2} \right)_{\substack{\sigma=0 \\ \beta=b}} \cdot \left( \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial (\beta^2)^2} \right)_{\substack{\sigma=0 \\ \beta=b}} . \quad (2.50)$$

Таким образом, стационарное решение (2.38) неустойчиво при  $\Omega^2 < 0$  или же, если принять во внимание уравнения (2.45) и (2.47)–(2.48)), при

$$\frac{\partial \mathcal{N}}{\partial \Lambda} < 0 , \quad (2.51)$$

что совпадает с формулировкой теорем Вахитова–Колоколова [78] и Лидке–Спатчека–Турицына [103], и с глубоким убеждением Кузмарцева [75]. К этому же выводу приводит аналогичное вышеизложенному рассмотрение случая произвольного значения  $p$ .

Итак, мы приходим к окончательному выводу, что стационарное решение (2.19) неустойчиво при  $\Lambda > \Lambda_{ext}$  и  $p < 4$ . В частности, сингулярный заострённый солитон (2.31) также оказывается неустойчивым. Этот вывод подтверждается нашими численными расчётами, представленными на рисунках 2.8 и 2.9.

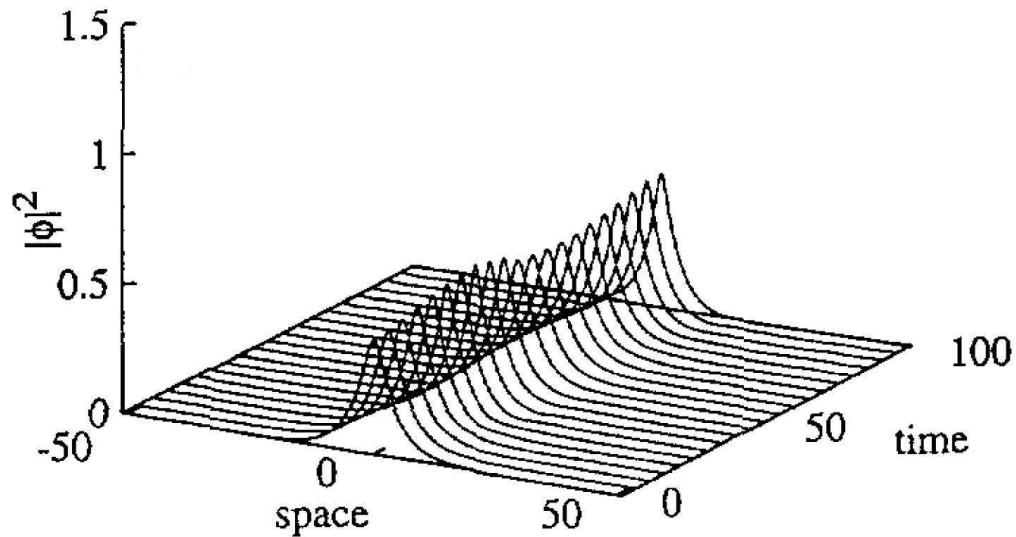


Рис. 2.8. Численное моделирование динамики локализованного возбуждения, слегка отличающегося от устойчивого стационарного решения (2.19), (2.25)–(2.26) при  $\Lambda = 0.279$ . Осциллирующее поведение, доказывающее устойчивость солитона.

Глядя на диаграммы, представленные на рисунках 2.6–2.7, мы видим, что для  $p \geq 4$  при любых значениях  $\Lambda$  имеет место неравенство  $\frac{d\mathcal{N}}{d\Lambda} < 0$ . Таким образом, неподвижные стационарные солитонные решения в случае  $p \geq 4$  оказываются неустойчивыми, независимо от значения  $\Lambda$  — результат, полностью совпадающий с выводами для обычного НУШ, а потому почти неинтересный. Так что мы не будем в дальнейшем интересоваться этими случаями и лучше, даже, ограничимся в дальнейшем лишь физически наиболее интересным случаем  $p = 2$ . Чтобы он стал ещё интереснее, мы заставим солитон двигаться...

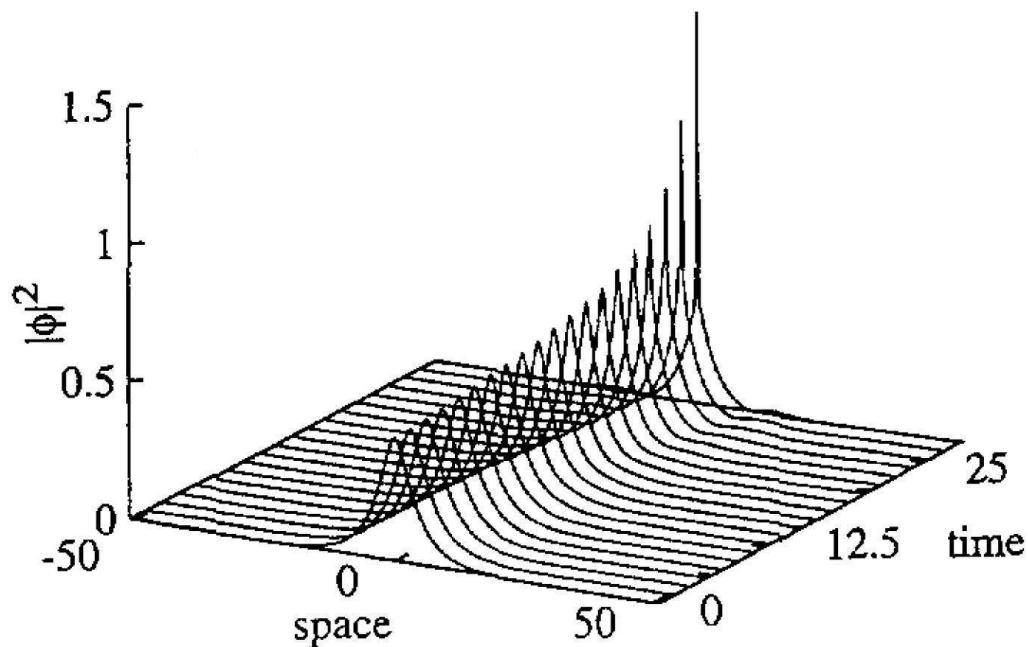


Рис. 2.9. Численное моделирование динамики локализованного возбуждения, слегка отличающегося от неустойчивого стационарного решения (2.19), (2.25)–(2.26) при  $\Lambda = 0.352$ . Коллапсирующее поведение, доказывающее неустойчивость солитона.

## 2.6. Излучение движущегося солитона

*Я буду идти, неуклонно держась своей природы, пока не свалюсь; лишь тогда я отдохну, отдав своё дыхание тому, из чего я черпал его ежедневно, и возвратившись туда, откуда изошло семя моего отца, кровь матери, молоко кормилицы, в ту землю, которая столько лет кормила и поила меня, которая носит меня, топчущего её и пользующегося сверх меры её дарами.*

*Марк Аврелий, “Наедине с собой. Размышления.”.*

Поскольку обычное НУШ является галилеево–инвариантным, его решение может перемещаться без изменения своей формы и скорости. Однако нелокальное НУШ утрачивает, вследствие своей “нелокальности” и галилеевскую инвариантность, и все преимущества с этим связанные. Чтобы понять свойства движущегося решения этого уравнения, мы перейдём в движущуюся систему координат  $\xi = z - v\tau$ , в которой центр масс возбуждения находится в покое. Воспользуемся преобразованием

$$\phi(z, \tau) = \varphi(\xi, \tau) \exp\left(\frac{i}{2}v\xi + i\lambda^2\tau + \frac{i}{4}v^2\tau\right), \quad (2.52)$$

где  $v$  – скорость. Применяя это преобразование к уравнению (2.18), мы получим для малых скоростей  $v$

$$i\partial_\tau\varphi - \frac{\lambda^2(1 - \partial_\xi^2) - (1 + iv\partial_\xi)\partial_\xi^2}{1 - iv\partial_\xi - \partial_\xi^2}\varphi + |\varphi|^2\varphi = 0. \quad (2.53)$$

Следуя Куелу и Зангу [82], мы воспользуемся преобразованием Фурье  $\varphi^F(k, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ik\xi)\varphi(\xi, \tau)d\xi$ , и перепишем уравнение (2.53) в пространстве волнового вектора

$$i\partial_\tau\varphi^F(k, \tau) - \omega_v(k)\varphi^F(k, \tau) + \Phi(k, \tau) = 0, \quad (2.54)$$

где линейный закон дисперсии волнового пакета в движущейся системе координат принимает вид  $\omega_v(k) = [\lambda^2(1 + k^2) + (1 + vk)k^2]/[1 - vk + vk^2]$ , а нелинейность  $\Phi(k, \tau) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ik\xi)|\varphi(\xi, \tau)|^2\varphi(\xi, \tau)d\xi$ .

Уравнение  $\omega_v(k) = 0$  имеет, кроме двух мнимых корней, связанных с солитонным решением, ещё и один действительный, имеющий при малых

скоростях  $v$  вид  $k = k_r \simeq -\frac{\lambda^2 + 1}{v}$ . Существование этого корня означает [82, 83], что волны с волновым вектором  $k_r$  будут резонансно возбуждаться солитоном, формируя осциллирующий хвост.

Разбивая волновую функцию на две части  $\varphi(\xi, \tau) = \phi_0(\xi) + f(\xi, \tau)$ , где первое слагаемое,  $\phi_0(\xi)$ , – стационарное решение, задаваемое выражением (2.19), а функция  $f(\xi, \tau)$  описывает изменение формы солитона и его излучение, мы получим уравнение для Фурье–спектра функции  $f(\xi, \tau)$

$$\begin{aligned} i\partial_\tau f^F - \omega_v(k) f^F &= (\omega_v(k) - \omega_{v=0}(k))\phi_0^F(k) \\ &- \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ik\xi) \left\{ \phi_0^2(2f + f^*) + \phi_0(f^2 + 2|f|^2) + |f|^2 f \right\} d\xi. \end{aligned} \quad (2.55)$$

В области резонанса  $k \simeq k_r$ , мы можем пренебречь нелинейными слагаемыми в уравнении (2.55), как это делалось в [82, 83, 84, 85], и воспользоваться приближением  $\omega_v(k) \simeq v(k - k_r)$ ,  $(\omega_v(k) - \omega_{v=0}(k))\phi_0^F(k_r) \simeq -(\lambda^2 + 1)\phi_0^F(k)$ . Тогда, возвращаясь к реальному пространству  $(\xi, \tau)$ , мы придём к линейному неоднородному уравнению

$$i\partial_\tau f - iv\partial_\xi f + (vk_r + 2\phi_0^2)f + \phi_0^2 f^* = -(\lambda^2 + 1)\phi_0^F(k_r)\delta(\xi). \quad (2.56)$$

При нулевом начальном условии  $f(\xi, \tau = 0) = 0$ , низкоскоростным ( $k_r \gg 1$ ) решением этого уравнения является выражение

$$f(\xi, \tau) = -ik_r\phi_0^F(k_r) \exp(-i\kappa_r\xi)(\theta(\xi + v\tau) - \theta(\xi)), \quad (2.57)$$

где  $\theta(\xi)$  – функция Хевисайда и

$$\kappa_r = k_r + \frac{1}{v\xi} \int_0^\xi |\phi_0(\xi')|^2 d\xi' \quad (2.58)$$

эффективный резонансный волновой вектор. Таким образом, движение солитона сопровождается излучением позади него хвоста с волновым вектором, пропорциональным скорости солитона  $v$ . Амплитуда излучения пропорциональна  $\phi_0^F(k_r)$  и для малых значений  $\lambda$  (то есть для малых значений

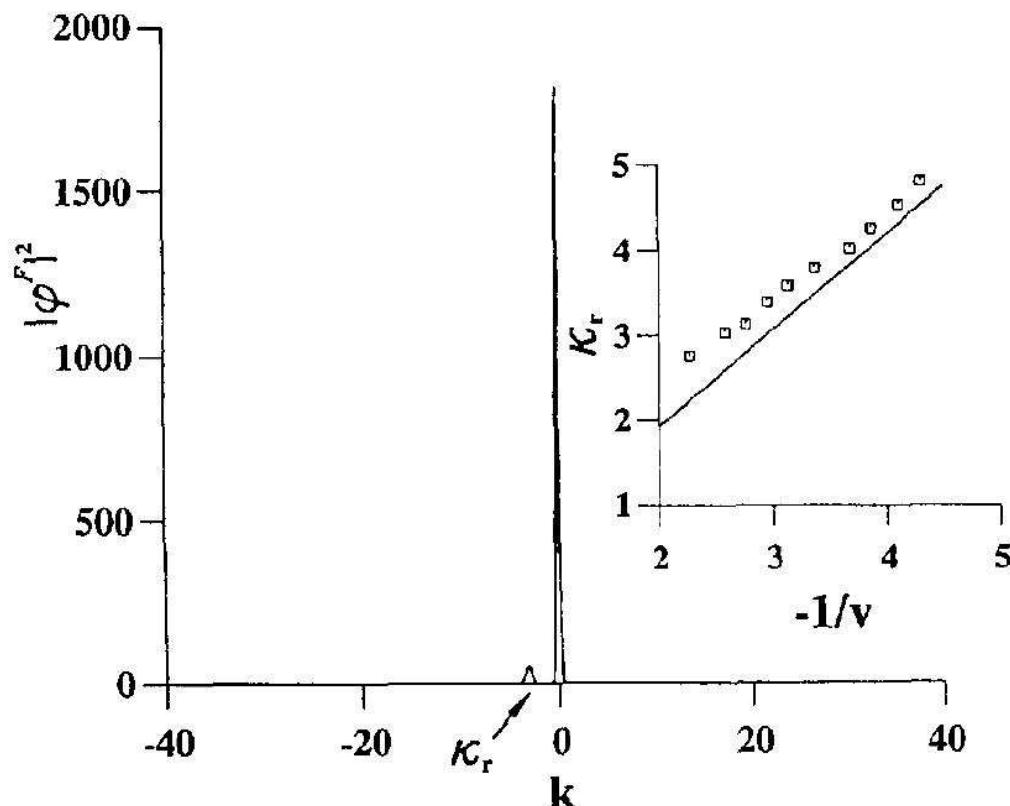


Рис. 2.10. Фурье-спектр движущегося солитона с пиками при  $k = 0$  (солитон) и  $k = \kappa_r$  (излучение). На вставке: зависимость волнового вектора излучения  $\kappa_r$  от скорости солитона  $v$  (квадраты – численное моделирование; прямая – по формуле (2.58))

нормы,  $\mathcal{N}$ ) она уменьшается как  $\exp(-\frac{\pi}{2\lambda v})$ . Как видим, явление излучения солитоном хвоста является непертурбативным по  $v$  и его нельзя было бы найти из теории возмущений, построенной по разложению решения в ряд по степеням скорости  $v$ . На рис. 2.10 показан Фурье-спектр движущегося солитона. Численное моделирование показывает, что зависимость резонансного волнового вектора от скорости солитона находится в разумном соответствии с нашими аналитическими предсказаниями и действительно близка к обратно-пропорциональной.

Чтобы рассчитать радиационную силу отдачи излучения, мы воспользуемся законом сохранения энергии солитона. Из уравнений (2.11) и (2.19) можно получить, что является справедливым соотношение  $\partial_\tau \mathcal{E} + \partial_z \mathcal{P} = 0$ , где введены плотность энергии  $\mathcal{E} = -\frac{1}{2}|\varphi|^4 - \left(\frac{1}{2}\varphi^* \frac{\partial_z^2}{1-\partial_z^2}\varphi + c.c.\right)$  и её поток

$$\mathcal{P} = -\frac{1}{2} \left\{ \left( \frac{\partial_\tau}{1-\partial_z^2} \varphi \right) \frac{\partial_z}{1-\partial_z^2} \varphi^* - \left( \frac{\partial_z \partial_\tau}{1-\partial_z^2} \varphi \right) \frac{1}{1-\partial_z^2} \varphi^* + c.c. \right\} \quad (2.59)$$

Подставляя в него найденное ранее выражение для излучения (2.57) движущегося солитона при больших  $\tau$  и  $z$ , мы получим что излучаемая солитоном мощность при малых скоростях

$$\mathcal{P}_r \simeq 2v |\phi_0^F(k_r)|^2 \quad (2.60)$$

В итоге, радиационная сила отдачи,  $F_d$ , определяемая уравнением  $F_d \cdot v = \mathcal{P}_r$ , равна  $F_d = 2|\phi_0^F(k_r)|^2$  и является, при малых значениях нормы, такой же экспоненциально малой, как и сама амплитуда хвоста:  $F_d \simeq 16\pi^2 \exp(-\pi/\lambda v)$ . Благодаря этому солитон будет двигаться постепенно замедляясь, но, по-видимому, всё же не остановится.

## 2.7. Заключение

*После опьянения победой всегда появляется чувство большой утраты: наш враг, наш враг мёртв! Даже потерю друга оплакиваем мы не столь глубоко — и*

оттого громче!

*Фридрих Ницше, “Человеческая всячина”.*

В данной главе мы предложили нелокальное нелинейное уравнение Шрёдингера для систем с насыщающимся законом дисперсии. Выяснилось, что в противоположность обычному НУШ, его неподвижные стационарные солитонные решения при  $p < 4$  существуют только в конечном интервале значений нормы волновой функции,  $N$ . В верхней части этого интервала имеются два стационарных решения, причём солитоны, соответствующие большим значениям спектрального параметра, являются неустойчивыми и коллапсируют за конечный интервал времени. Форма солитона изменяется от колоколообразной (при малых  $N$ ) до заострённой (при окколокритических  $N$ ). При максимальном значении спектрального параметра решением является заострённый солитон с сингулярной зависимостью по координате. При значении нормы, превышающем критическое, любое начальное распределение, в зависимости от степени первоначальной локализации, либо расплывается, либо коллапсирует. Таким образом, мы можем сделать вывод, что принятие во внимание дисперсионной нелокальности приводит к возможности коллапса даже при  $p < 4$ , если только  $N$  достаточно велико. При  $p \geq 4$  ситуация качественно не отличается от бывшей для обычного НУШ: стационарные солитонные решения являются неустойчивыми при любых значения спектрального параметра.

Движущийся солитон излучает энергию с длиной волны, пропорциональной скорости солитона. Интенсивность излучения экспоненциально уменьшается с уменьшением скорости и (или) значения нормы. В результате солитон замедляется, однако время уменьшения скорости солитона до нуля является, по-видимому, бесконечно большим.

## Глава 3.

# Эффекты нелокальных дисперсионных взаимодействий в дискретном НУШ

Тут целый мир, живой, разнообразный,  
Волшебных звуков и волшебных снов, —  
О, этот мир так молодо-прекрасный —  
Он стоит тысячи миров.

*Фёдор Тютчев, 1872.*

### 3.1. Введение

В предыдущей главе и работах [16, 17, 18] мы постарались выяснить роль дисперсионной нелокальности в системах, описывающих континуальным нелинейным уравнением Шрёдингера (НУШ). Важную роль в таких системах играют солитонные возбуждения. Как было показано, при некоторых условиях учёт нелокальности может приводить к потере солитоном его устойчивости и к коллапсу возбуждения. Сталкиваясь с коллапсом, мы уже не можем доверять континуальному описанию и должны учитывать дискретность структуры реальных систем, таких как биологические макромолекулы [2, 10], органические полупроводники [86, 87], пучки оптических волокон, системы связанных Джозефсоновских контактов...

Учёт дискретности приводит к открытию новых, сильнолокализованных состояний, интенсивно изучаемых в последние годы многими авторами [88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97]. Это универсальный тип возбуждений —

при достаточно сильной нелинейности, он существует практически в любой дискретной системе, каким бы уравнением она не описывалась: он есть и в одноатомных ангармонических цепочках [92, 93, 94], и в цепочках, описываемых нелинейным уравнением Шрёдингера [98] и рассматриваемых в данной главе.

Интерес к дискретному НУШ не угасает со времён открытия его интегрируемого варианта — уравнения Абловица–Ладика (УАЛ) [88]. Так, недавно было предложено [99, 100] дискретное НУШ с вариационными параметрами при диагональных и недиагональных нелинейных слагаемых, одним из частных случаев которого является УАЛ. При этом было показано, что зеркальная и трансляционная симметрии, присущие УАЛ, нарушаются при введении диагональной нелинейности, а также были изучены свойства потенциала Пайерлса–Набарро как функции вариационных параметров уравнения. Исследование свойств его стационарных состояний продолжилось в работе [101]. Изучалась также [102] и динамика одномерного дискретного НУШ с произвольным показателем степени нелинейности. Здесь показатель степени нелинейности играл роль параметра, позволяющего смоделировать главные особенности эквивалентных многомерных систем. Важным достижением в исследовании этой системы стало недавнее доказательство Лидке, Спатчеком и Турицыным [103] аналитического критерия устойчивости солитонов. Они же рассмотрели процесс квазиколлапса слаболокализованного солитона в сильнолокализованный, имеющий место при увеличении показателя степени нелинейности, — этот процесс соответствует коллапсу в континуальной модели.

Заметим, что во всех вышеупомянутых исследованиях предполагалось, что дисперсионные межмолекулярные взаимодействия являются короткодействующими и использовалось приближение ближайших соседей.

Однако существуют физические системы, которые определённо не могут быть корректно описаны в рамках этого приближения. Так, перенос внутримолекулярного возбуждения в молекулярных кристаллах [61] и биополимерах [10] происходит благодаря резонансному диполь–дипольному взаимодействию, интенсивность которого ослабевает с расстоянием,  $R$ , между молекулами по закону  $1/R^3$ . Молекула ДНК, с другой стороны, содержит заряженные группы с дальнодействующим кулоновским взаимодействием ( $1/R$ ) между ними.

До недавнего времени имелись лишь немногие теоретические и численные исследования свойств нелинейных возбуждений, учитывающие дальнодействующий характер межмолекулярных взаимодействий. Так, изучались [65] нелинейные волны в одномерной цепочке с межатомным потенциалом Леннарда–Джонса  $(2n, n)$  и было показано, что их динамика описывается уравнением Бенджамина–Оно в случае  $n = 2$  и уравнением Кортеуге–де Вриза при  $n \geq 4$ . В главе мы показываем, что подобная резкая смена типа уравнения движения при изменении характера нелокальности присуща и дискретному НУШ. Эффективная масса солитонов, их форма и барьеры Пайерлса в нелокальной модели Френкеля–Канторовой изучались в работе [68]. В статье [71] найдена форма солитонных решений уравнения синус–Гордона с нелокальностью Кек–Бейкеровского типа [79, 80] и проанализирована зависимость ширины и энергии солитонов от эффективного радиуса дальнодействия. Введение нелокальности в нелинейное слагаемое уравнения синус–Гордона, предложенное в [69], приводит к возникновению новых типов солитонных состояний, в том числе с нулевым топологическим зарядом, при достаточно большом радиусе нелокальности. Эффекты, связанные с учётом Кек–Бейкеровской нелокальности в уравнении Клейна–Гордона, также не остались без внимания [68, 70, 72].

В работе [67] изучалась роль дальнодействующего гармонического взаимодействия в цепочке с короткодействующим ангармонизмом. Было показано, что наличие двух конкурирующих масштабов длины приводит к существованию двух типов существенно отличных солитонов с различными скоростями, причём эти типы солитонов существуют в двух непересекающихся областях скоростей, разделенных щелью.

В данной главе рассматриваются эффекты, связанные с учётом нелокального характера межмолекулярного резонансного взаимодействия, приводящего к перескоку внутримолекулярного возбуждения между молекулами. Очень часто это взаимодействие носит степенной характер

$$J_{n,m} = \frac{J}{R_{n,m}^\ell} \quad (3.1)$$

где  $\ell = 3$  для диполь–дипольного взаимодействия (0.4),  $\ell = 5$  для квадруполь–квадрупольного взаимодействия и т. д.

Во всех прежних исследованиях дискретного НУШ, использовавших приближение ближайших соседей, можно было не обращать внимания на реальную конформацию молекулярной цепочки: она никак не влияла на изучаемые свойства системы. Теперь же, когда мы учитываем взаимодействие и между далёкими молекулами, нам необходимо знать расстояние между ними. Однако, расстояние  $R_{n,m}$  между *несоседними* молекулами полностью определяется конформацией цепочки; и только лишь в случае линейной цепочки оно пропорционально  $|n - m|$ . Это обстоятельство часто упускается из вида при обсуждении того, какие именно зависимости  $J_{n,m}$  являются физически реализуемыми и, следовательно, достойными внимания. Действительно, реальные макромолекулы весьма далеки от линейных: вспомним хотя бы классическую теорию Флори [104, 105], которая даёт для гибких цепочек зависимость  $R_{n,m} \simeq |n - m|^\nu$ , с показателем  $\nu = 3/(d + 2)$ , где  $d$  – размерность пространства, в которое за-

ключена молекулярная система. Фактически, это соотношение является естественным следствием из определения фрактальной системы с размерностью Хаусдорфа–Безиковича [106], равной  $D = 1/\nu \geq 1$ . Многие эксперименты с полимерами [107] и белками [108, 109] действительно указывают на их фрактальную структуру (с  $D \simeq 1.5 \div 1.7$  для миоглобина, например). В результате, мы приходим к степенному ядру нелокальности

$$J_{n,m} \simeq \frac{J}{|n - m|^s}, \quad (3.2)$$

с показателем  $s = \ell/D$ , что делает актуальным рассмотрение нецелых значений  $s$  наряду с целыми его значениями (так, для миоглобина значение  $s = 1.8 \div 2.0$ ). Интересно отметить при этом, что фрактальная размерность  $D$  цепочки должна изменяться при конформационных переходах типа “спираль–клубок” или “глобула–клубок”, что приведёт к зависимости  $s$  от внешних условий.

Вполне отдавая себе отчёт в статистическом характере формулы (3.2), мы всё же возьмём её за основу в данной главе, поскольку, хоть и в первом приближении, она позволяет всё же учесть пространственную конформацию цепочки и продемонстрировать важность такого учёта при наличии диполь–дипольного или более дальнодействующего резонансного взаимодействия.

В следующем разделе мы записываем дискретное нелокальное нелинейное уравнение Шрёдингера и начинаем искать его стационарные солитонные решения. Вначале, в разделе 3.3, описывается численный метод, используемый для их нахождения. В разделе 3.4 коротко рассматривается экспоненциальное ядро нелокальности. Это позволяет сравнить эффекты нелокальности в дискретном НУШ с эффектами в континуальном НУШ, рассмотренном во второй главе. Самый большой раздел 3.5 посвящён исследованию эффектов, характерных для степенной нелокальности. В его

первом подразделе 3.5.1 мы исследуем систему аналитически, используя вариационный метод с экспоненциальной пробной функцией. Это позволяет сделать вывод о наличии критического показателя степени нелокальности,  $s_{cr}$ , и о возможности существования в системе двух типов солитонов (слабо– и сильнолокализованных) при  $s < s_{cr}$ . Эффективность использованного метода доказывается сравнением с численными расчётами. Затем, в подразделе 3.5.2, доказывается критерий устойчивости экситонов. Показывается, что имеется второе критическое значение показателя степени нелокальности,  $s_{ex}$ , и что экситон становится устойчивым при  $s < s_{ex}$ . В подразделе 3.5.3 мы изучаем солитонные состояния в квазиконтинуальном приближении. Показывается, что вид уравнения, описывающего систему в континуальном пределе существенно зависит от значения степени нелокальности  $s$ . В частности, для  $s = 2$  уравнение движения имеет форму, близкую к форме уравнения Бенджамина–Оно. В случае кубической нелинейности это уравнение, которое мы называем Гильберт–НУШ, имеет решение в виде алгебраического солитона.

Завершается глава заключительным разделом 3.6, где обсуждаются эффекты, к которым, по результатам главы, должна приводить нелокальность в реальных молекулярных цепочках.

В основу данной главы легли результаты исследований, частично отражённые в работах [19, 20].

### 3.2. Дискретные уравнения движения

Исследуемая нами в данной главе дискретная модель описывается гамильтонианом

$$H = T + U , \quad (3.3)$$

с дисперсионной энергией возбуждения,  $T$ , равной

$$T = \frac{1}{2} \sum_{n,m} \sum_{(n \neq m)} J_{n,m} |\psi_m - \psi_n|^2 , \quad (3.4)$$

и потенциальной энергией,  $U$ , описывающей самодействие квазичастицы и имеющей вид

$$U = -\frac{1}{\sigma + 1} \sum_n |\psi_n|^{2(\sigma+1)} , \quad (3.5)$$

Здесь  $n$  и  $m$  – индексы, определяющие положение молекул в цепочке, а  $\psi_n$  – волновая функция возбуждения  $n$ -той молекулы. Перенос возбуждения с молекулы  $n$  на молекулу  $m$  определяется значением  $J_{n,m}$  энергии резонансного взаимодействия молекул. Степень нелинейности  $\sigma$  часто вводится для моделирования многомерных свойств системы [102, 103, 111, 112]. Обычно же, в первом приближении, физические системы приводят к значению  $\sigma = 1$ , о котором мы и будем говорить наиболее детально.

Гамильтонианы (3.3)–(3.5) соответствуют уравнениям движения волновой функции возбуждения  $i\partial_t \psi_n = \frac{\partial H}{\partial \psi_n^*}$ , которые можно записать в виде

$$i\partial_t \psi_n + \sum_{m(m \neq n)} J_{n,m} (\psi_m - \psi_n) + |\psi_n|^{2\sigma} \psi_n = 0 . \quad (3.6)$$

Нетрудно убедиться, что гамильтониан,  $H$ , и норма

$$N = \sum_n |\psi_n|^2 , \quad (3.7)$$

являются интегралами движения этой системы уравнений.

Пока что, делая только первый шаг в изучении системы (3.6), мы будем интересоваться лишь её стационарными неподвижными решениями, имеющими вид

$$\psi_n = \phi_n \exp(i\Lambda t) , \quad (3.8)$$

с вещественной огибающей волновой функции,  $\phi_n$ , и спектральным параметром,  $\Lambda$ . Легко видеть при этом, исходя из уравнений движения (3.6),

что функция  $\phi_n$  является решением системы нелинейных уравнений

$$\Lambda\phi_n = \sum_{m(m \neq n)} J_{n,m}(\phi_m - \phi_n) + \phi_n^{2\sigma+1}. \quad (3.9)$$

В основном, оставшаяся часть главы будет посвящена анализу солитонных решений этого уравнения при различных ядрах нелокальности  $J_{n,m}$ .

В качестве основного ядра нелокальности мы будем использовать степенное, важность которого детально обсуждалась во введении к главе. Как будет показано, соответствующие ему стационарные решения обладают многими довольно неожиданными свойствами и возникает вопрос о том, какие из обнаруженных нами эффектов связаны с конкретным выбором вида нелокальности, а какие характерны для любого из них. Поэтому, вначале мы рассмотрим экспоненциальное ядро нелокальности, использованное нами ещё в предыдущей главе. При этом, по сути, мы преследуем и дополнительные цели, — во первых, хочется сравнить рассмотренный во второй главе континуальный случай с изучаемым здесь дискретным и, таким образом, выявить в “чистом виде” роль *дискретности*. Во вторых, мы воспользуемся результатами этого сравнения, чтобы обосновать, хоть как-то, выбор экспоненциальной пробной функции, использованной в разделе 3.5.1

Здесь мало что можно сделать аналитически точно и мы не можем обойтись без численного решения системы (3.9). Так что в следующем разделе мы кратко опишем использованный нами метод её решения.

### 3.3. Метод численного решения системы

Для численного решения системы (3.9) нам удобно переформулировать постановку задачи. Именно, введём вспомогательную положительно-

определенную функцию

$$\mathcal{E} = \sum_n \varepsilon_n^2 \geq 0 , \quad (3.10)$$

где

$$\varepsilon_n = \Lambda \phi_n - \sum_{m(m \neq n)} J_{n,m} (\phi_m - \phi_n) - \phi_n^{2\sigma+1} . \quad (3.11)$$

Нетрудно видеть, что решения системы (3.9) совпадают с решениями уравнения  $\mathcal{E} = 0$ , которое можно решать, минимизируя  $\mathcal{E}$  при заданном значении  $\Lambda$ .

Для минимизации  $\mathcal{E}$  был использован метод наискорейшего спуска. Обычно расчёты проводились на цепочках из  $300 \div 1000$  молекул при точности  $\mathcal{E} < 10^{-9} \div 10^{-11}$ .

Для каждого найденного решения мы вычисляли, кроме его энергии и нормы, среднюю ширину солитона

$$\Delta = \left[ \frac{1}{N} \sum_n (n - n_0)^2 \phi_n^2 \right]^{1/2} , \quad (3.12)$$

где  $n_0$  – молекула, на которой лежит центр солитона. Определенная таким образом величина  $\Delta$  оказывается довольно близкой к ширине солитона на его полувысоте.

Результаты описанных здесь численных расчётов будут приводиться в следующих разделах, по мере возникновения необходимости в них.

### 3.4. Экспоненциальная нелокальность

*В усталости нами овладевают и давно преодолённые понятия.*

*Фридрих Ницше, “Злая мудрость”.*

В этом разделе мы рассмотрим экспоненциальное ядро нелокальности

$$J_{n-m} = (e^\alpha - 1) e^{-\alpha |m-n|} . \quad (3.13)$$

Напомним, что оно уже использовалось нами во второй главе, где решалась задача, практически совпадающая с рассматриваемой здесь, но только континуальная. Являясь функцией Грина простого дифференциального оператора, это ядро нелокальности позволило полностью решить задачу аналитически. Теперь же, мы хотим воспользоваться результатами предыдущей главы, чтобы выявить в чистом виде роль дискретности в системах с нелокальной дисперсией.

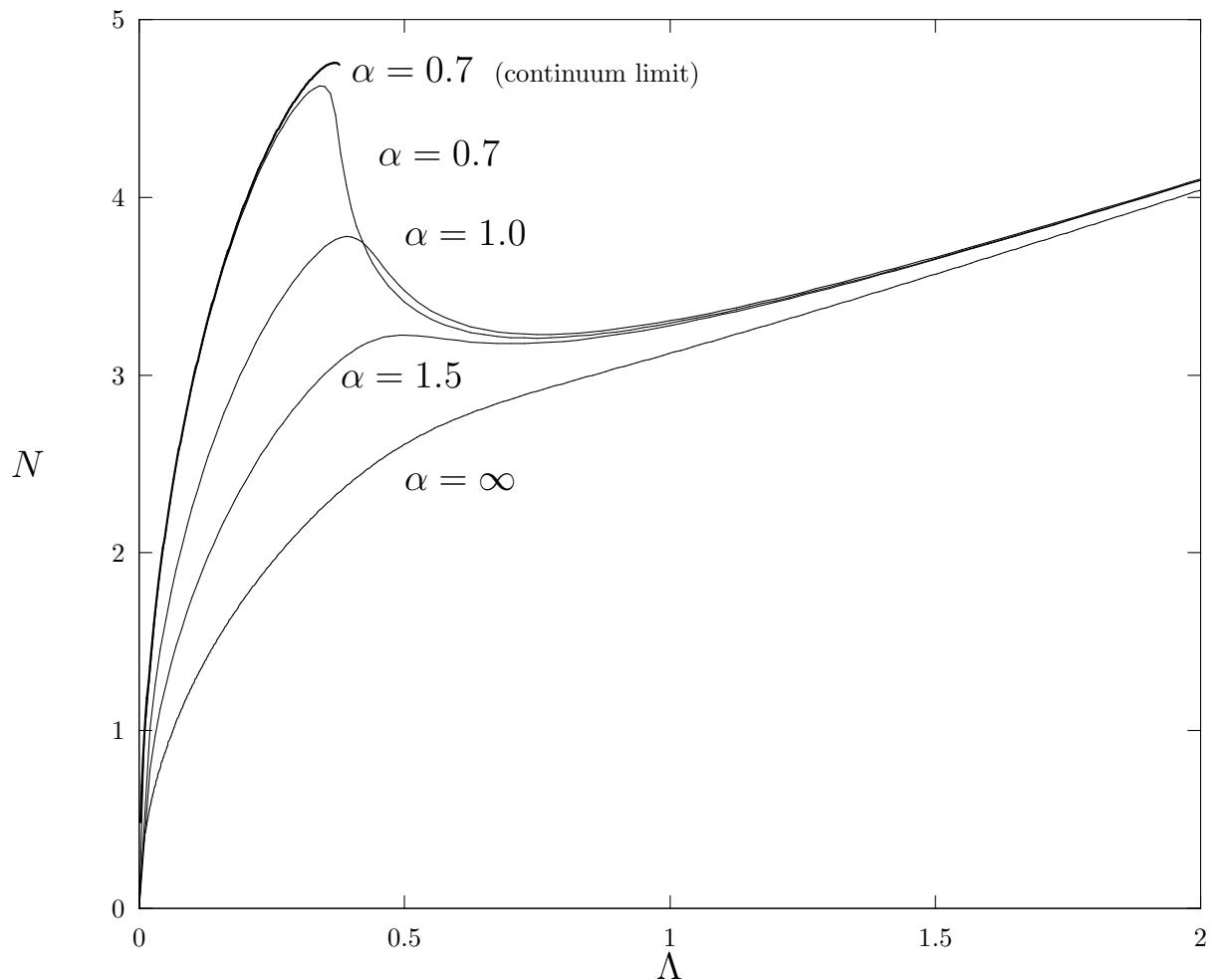


Рис. 3.1. Зависимость нормы решения уравнения (3.16) при  $\alpha = 0.7$  и численно найденных решений системы (3.9), (3.13) при  $\alpha = 0.7, 1.0, 1.5$  и  $\infty$  от спектрального параметра.

В континуальном случае мы не имели ни одного безразмерного па-

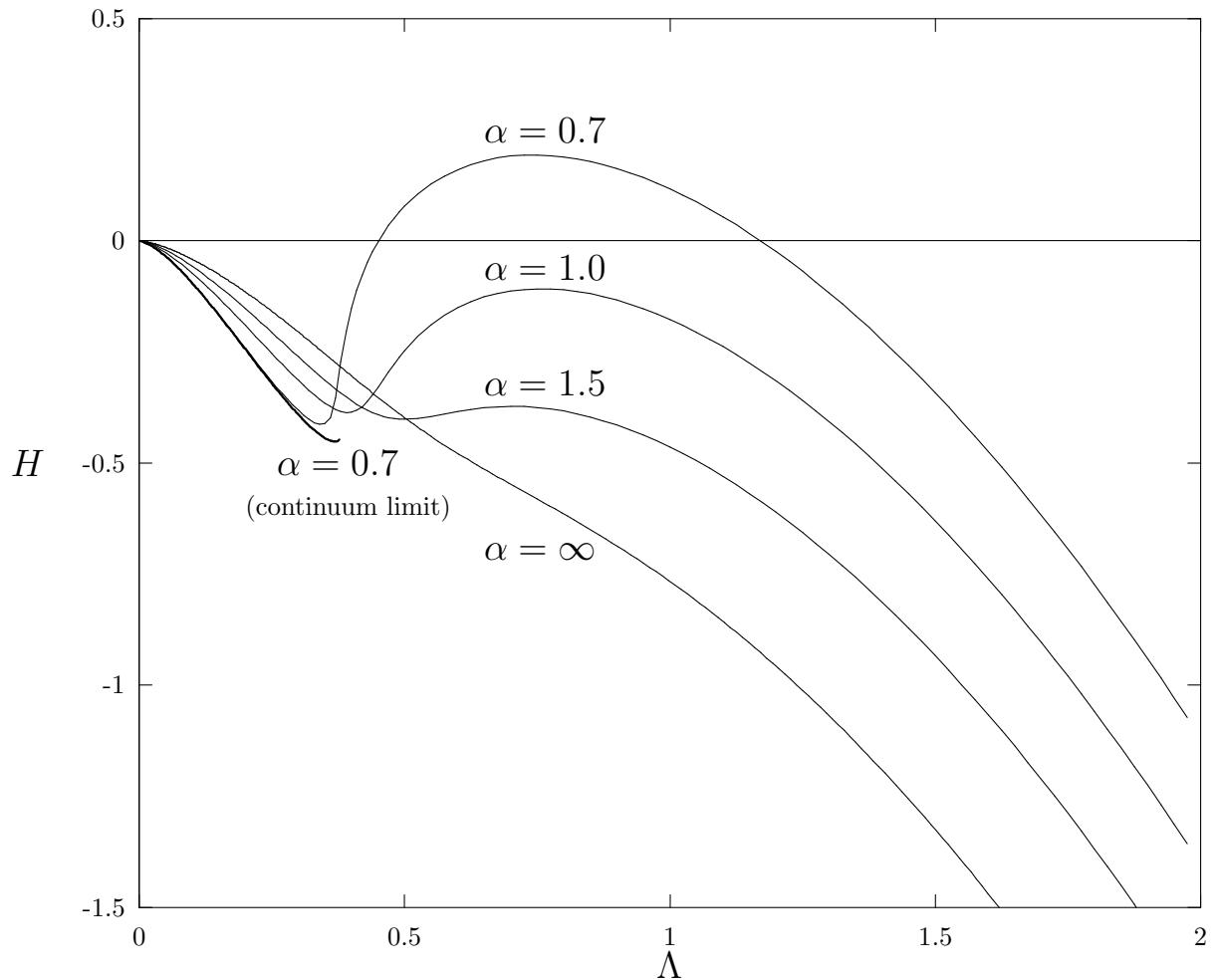


Рис. 3.2. Зависимость энергий решения уравнения (3.16) при  $\alpha = 0.7$  и численно найденных решений системы (3.9), (3.13) при  $\alpha = 0.7, 1.0, 1.5$  и  $\infty$  от спектрального параметра.

метра, что жёстко фиксировало свойства системы: стационарные состояния существовали лишь в некотором промежутке значений нормы, вблизи верхнего конца которого существовал второй тип заострённых неустойчивых стационарных солитонов и за пределами которого происходил коллапс волновой функции.

Что новое можно ожидать *a priori* в дискретном случае? Во первых, вместо коллапса должна происходить локализация энергии на “одной” молекуле, что приведёт к появлению новой ветви *сильнолокализованных*

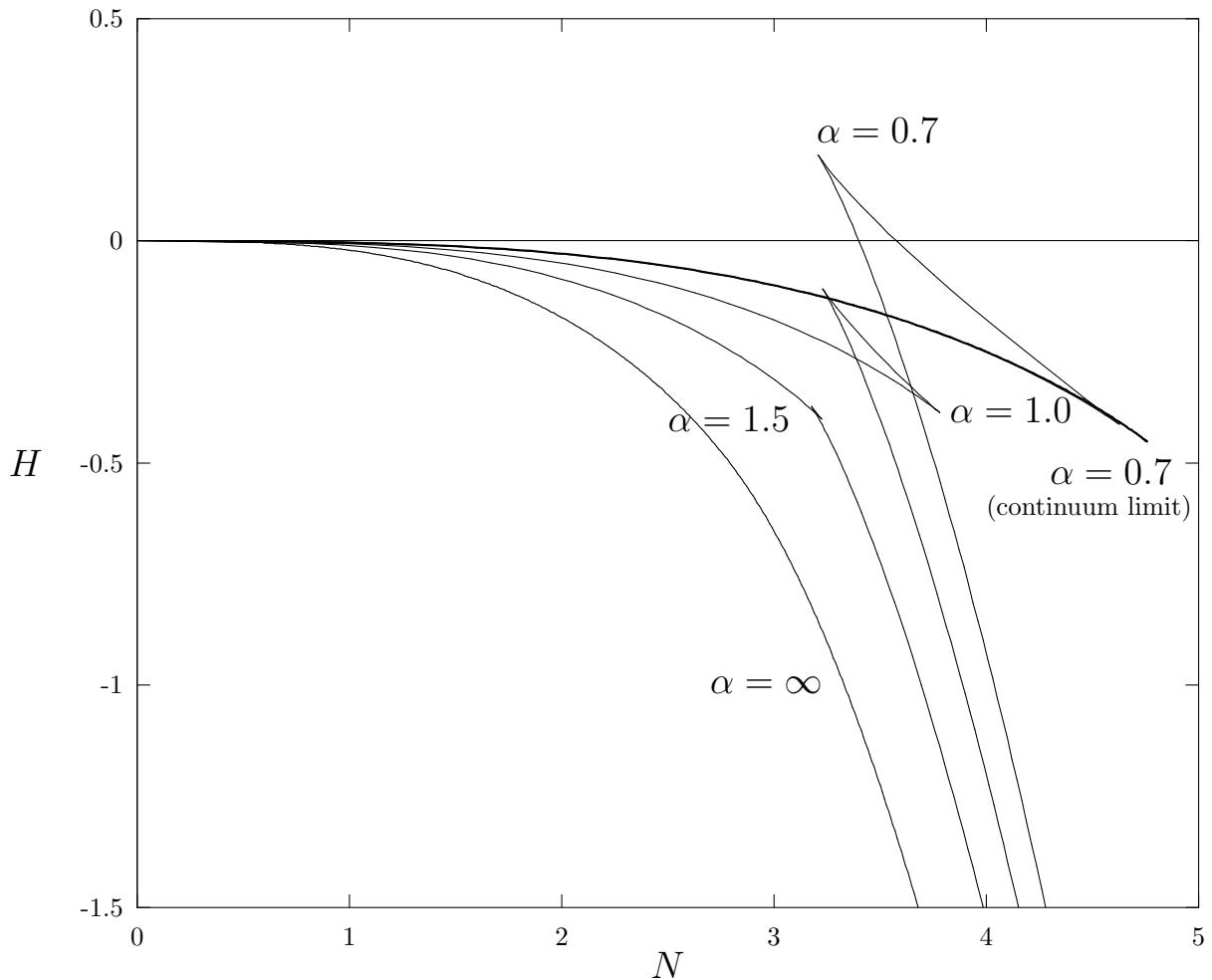


Рис. 3.3. Зависимость энергий решения уравнения (3.16) при  $\alpha = 0.7$  и численно найденных решений системы (3.9), (3.13) при  $\alpha = 0.7, 1.0, 1.5$  и  $\infty$  от нормы.

солитонов. Во вторых, в случае, когда радиус нелокальности достаточно велик (так что хорошо работает континуальное приближение), должна сохраняться ветвь неустойчивых солитонов. Учитывая новую ветвь сильно-локализованных состояний, это приведёт к существованию интервала значений нормы с тремя стационарными состояниями, одно из которых будет неустойчивым. В третьих, в системе появляется безразмерный параметр — отношение радиуса нелокальности к постоянной решётки. И можно ожидать, что только при достаточно большом его значении конкуренция меж-

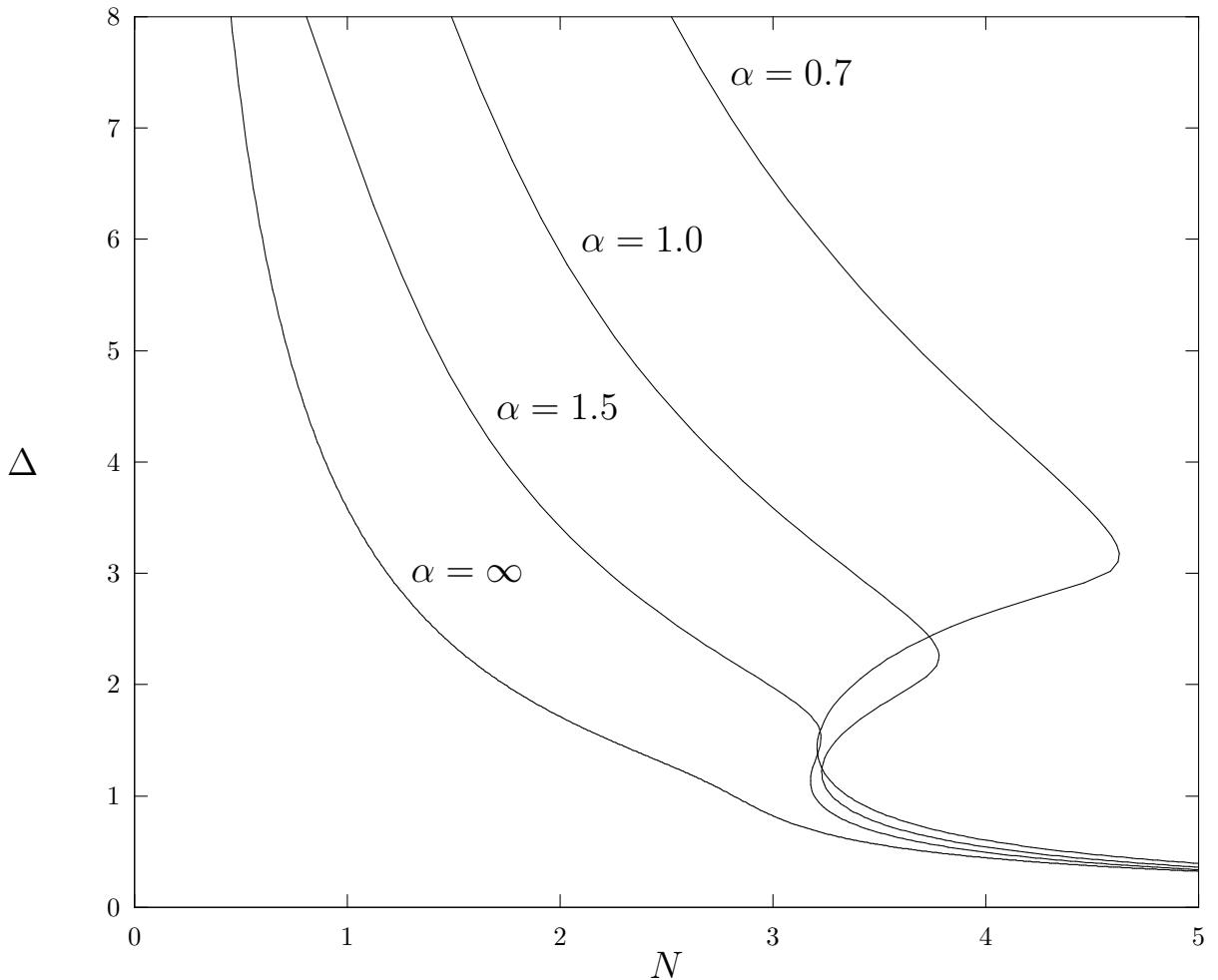


Рис. 3.4. Зависимость ширины численно найденных решений системы (3.9), (3.13) при  $\alpha = 0.7, 1.0, 1.5$  и  $\infty$  от нормы.

ду нелокальностью и дискретностью будет происходить достаточно ярко, чтобы позволить проявиться новым интересным эффектам.

Перейдём, для сравнения дискретной модели с континуальной, к пространственно распределённой волновой функции

$$\psi_m(t) \rightarrow e^{(m-n)\partial_x} \psi(x, t) |_{x=n}, \quad (3.14)$$

и воспользуемся тождеством

$$\sum_{m(m \neq n)} e^{-\alpha|m-n| + (m-n)\partial_x} \equiv \frac{\cosh(\partial_x) - e^{-\alpha}}{\cosh(\alpha) - \cosh(\partial_x)}. \quad (3.15)$$

Тогда, в приближении  $\cosh(\partial_x) \approx 1 + \partial_x^2/2$ , система (3.6) сводится к уравнению

$$i\partial_t\psi + \frac{(e^\alpha + 1)\partial_x^2}{4\sinh^2(\alpha/2) - \partial_x^2}\psi + |\psi|^{2\sigma}\psi = 0. \quad (3.16)$$

Чтобы не усложнять картину ненужными деталями, мы будем интересоваться здесь только случаем  $\sigma = 1$ . При этом, если перейти к новым переменным

$$z = 2\sinh(\alpha/2)x, \quad \tau = (e^\alpha + 1)t, \quad \phi(z, \tau) = \frac{1}{\sqrt{e^\alpha + 1}}\psi(x, t), \quad (3.17)$$

это уравнение совпадёт с (2.18) при  $p = 2$ , причём энергия и норма стационарных состояний будут определяться выражениями

$$N = \frac{e^\alpha + 1}{2\sinh(\alpha/2)}\mathcal{N} \quad H = \frac{(e^\alpha + 1)^2}{2\sinh(\alpha/2)}\mathcal{H}, \quad (3.18)$$

с  $\mathcal{N}$  и  $\mathcal{H}$ , найденными по формулам (2.34) и (2.35).

Вследствие самого характера континуального приближения, решения уравнения (3.16) должны быть близки к решениям дискретной системы (3.6) в случаях, когда радиус нелокальности достаточно велик ( $\alpha \lesssim 1$ ), а солитон достаточно широк ( $\Lambda \lesssim 1$ ). Это подтверждается графиками 3.1–3.3, на которых сравниваются решения этих двух систем при  $\alpha = 0.7$ . На этих рисунках приводятся зависимости  $N(\Lambda)$ ,  $H(\Lambda)$  и  $H(N)$ , о важности которых для анализа характера устойчивости решений мы говорили ещё в предыдущей главе. Напомним, что критерий устойчивости был прост: решение устойчиво, если  $\frac{dN}{d\Lambda} > 0$  и неустойчиво в противном случае. Как будет показано в разделе 3.5.1, этот критерий остаётся справедливым и в дискретном случае, — а пока что просто воспользуемся им. Мы видим, что представленные на рисунках зависимости подтверждают все сделанные выше предположения о характере стационарных решений дискретной системы. Действительно, численные расчёты показывают, что если  $\alpha > \alpha_{cr} \approx 1.67$ ,

то свойства системы качественно не отличаются от её свойств в приближении ближайших соседей ( $\alpha = \infty$ ): при любом значении  $N$  имеется лишь одно стационарное состояние. Если же  $\alpha < \alpha_{cr}$ , то появляется новый интересный эффект мультистабильности солитонных решений: имеется интервал значений  $N$ , где существуют три стационарных решения, одно из которых является неустойчивым. Теперь уже в системе нет плавного перехода слаболокализованных солитонов в сильнолокализованные: напротив, эти солитоны становятся резко различными и могут существовать, так что можно с полным правом говорить о наличии в системе *двух типов солитонов: слабо- и сильнолокализованных* (см. рис. 3.4 для сравнения ширины солитонов). Но, чтобы не повторяться дважды, мы обсудим свойства всех этих солитонов подробнее в следующих разделах, на примере более интересной системы со степенным ядром нелокальности.

### 3.5. Степенная нелокальность

В данном разделе мы, наконец, приступаем к изучению дискретного НУШ со степенной нелокальностью

$$J_{n-m} = \frac{J}{|n-m|^s}, \quad (3.19)$$

Для расчёта кинетической энергии  $T$ , воспользуемся преобразованием Фурье

$$\Phi(k) = \sum_n e^{ikn} \phi_n, \quad J(k) = \sum_{n \neq 0} e^{ikn} J_n, \quad (3.20)$$

что позволяет нам переписать выражение (3.4) в форме

$$T = \frac{1}{M} \sum_k \mathcal{L}(k) |\Phi(k)|^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \mathcal{L}(k) |\Phi(k)|^2. \quad (3.21)$$

Здесь введена спектральная функция

$$\mathcal{L}(k) = J(0) - J(k), \quad (3.22)$$

которая определяет линейную дисперсию возбуждений. Величина  $M$  – это число молекул в цепочке и оно достаточно велико. Для удобства мы будем считать, что  $J = 1/\zeta(s)$ , где  $\zeta(s)$  – дзета-функция Римана, определяемая выражением

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-s}. \quad (3.23)$$

При таком выборе  $J$ , значение  $J(0)$  не будет зависеть от  $s$ . Принимая во внимание тождество

$$n^{-s} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{\infty} z^{s-1} e^{-nz} dz, \quad (3.24)$$

мы можем переписать  $J(k)$  в интегральном виде

$$\begin{aligned} J(k) &= \frac{2}{\zeta(s)} \sum_{n=1}^{\infty} n^{-s} \cos(kn) \\ &= \frac{2}{\zeta(s)\Gamma(s)} \int_0^1 dz \frac{(\cos k - z)(\ln(1/z))^{s-1}}{z^2 - 2z \cos k + 1}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

которое будет использовано в следующем разделе. При чётных значениях  $s$ , это выражение легко приводится к явному виду [110]. Так, например, для  $s = 2$  спектральная функция

$$\mathcal{L}(k) = \frac{6}{\pi}k - \frac{3}{\pi^2}k^2 \quad \text{для } s = 2. \quad (3.26)$$

Используя формулу суммирования рядов Эйлера–Маклорена, мы можем также найти приближённое значение  $\mathcal{L}(k)$  при произвольных  $s$ , но малых  $k$ . В разделе 3.5.2, при рассмотрении вопроса устойчивости экситонного состояния, мы воспользуемся тем, что при  $1 < s < 3$

$$\mathcal{L}(k) \simeq \frac{2^{3-s}}{\zeta(s)} \left[ \int_0^{\infty} \frac{\sin^2(z)}{z^s} dz \right] k^{s-1} - \frac{s-1}{2(3-s)\zeta(s)} k^2. \quad (3.27)$$

Но попытаемся всё же, хотя бы приближённо, продвинуться дальше аналитически.

### 3.5.1. Экспоненциальная пробная функция

*Пути Господни в природе и в Промысле его не наши пути, и уподобления, к которым мы прибегаем, никоим образом несоизмеримы с необъятностью, неисчерпаемостью и непостижимостью его деяний, глубина коих превосходит глубину Демокритова колодца.*

*Джозеф Гленвилл.*

Трудно надеяться решить уравнение (3.9) аналитически. Но нам ведь не так уж и необходимо точное решение, ибо и сама система является всего лишь моделью. Для понимания же её основных свойств, достаточно иметь хорошее качественное, но аналитическое, описание. Очень часто его представляют вариационные методы, простейшим вариантом которого мы здесь и воспользуемся. Роковым шагом при этом является выбор пробной волновой функции. Обычно этот выбор трудно обосновать *aприори* и приходится довольствоваться лишь намёками... Из рис. 3.1–3.3 видно, что решения в континуальном и дискретном случаях остаются близкими вплоть до начала области бистабильности. Напомним, что как было показано в предыдущей главе, решение континуального нелокального НУШ в этой области становится заострённым (см. рис. 2.2–2.3) и обрывается предельно заострённым сингулярным солитоном (2.31). Можно надеяться, что и для степенной нелокальности в области бистабильности солитоны имеют похожую форму (что подтверждает также рис. 3.5) и воспользоваться пробной функцией вида

$$\phi_n = (N \tanh \beta)^{1/2} \exp(-\beta|n|), \quad (3.28)$$

где  $\beta$  – вариационный параметр.

При таком выборе пробной функции условие нормировки (3.7) удовлетворяется автоматически. Фурье-образ пробной функции имеет вид

$$|\Phi(k)|^2 = \frac{N \sinh^3 \beta}{\cosh \beta (\cosh \beta - \cos k)^2}, \quad (3.29)$$

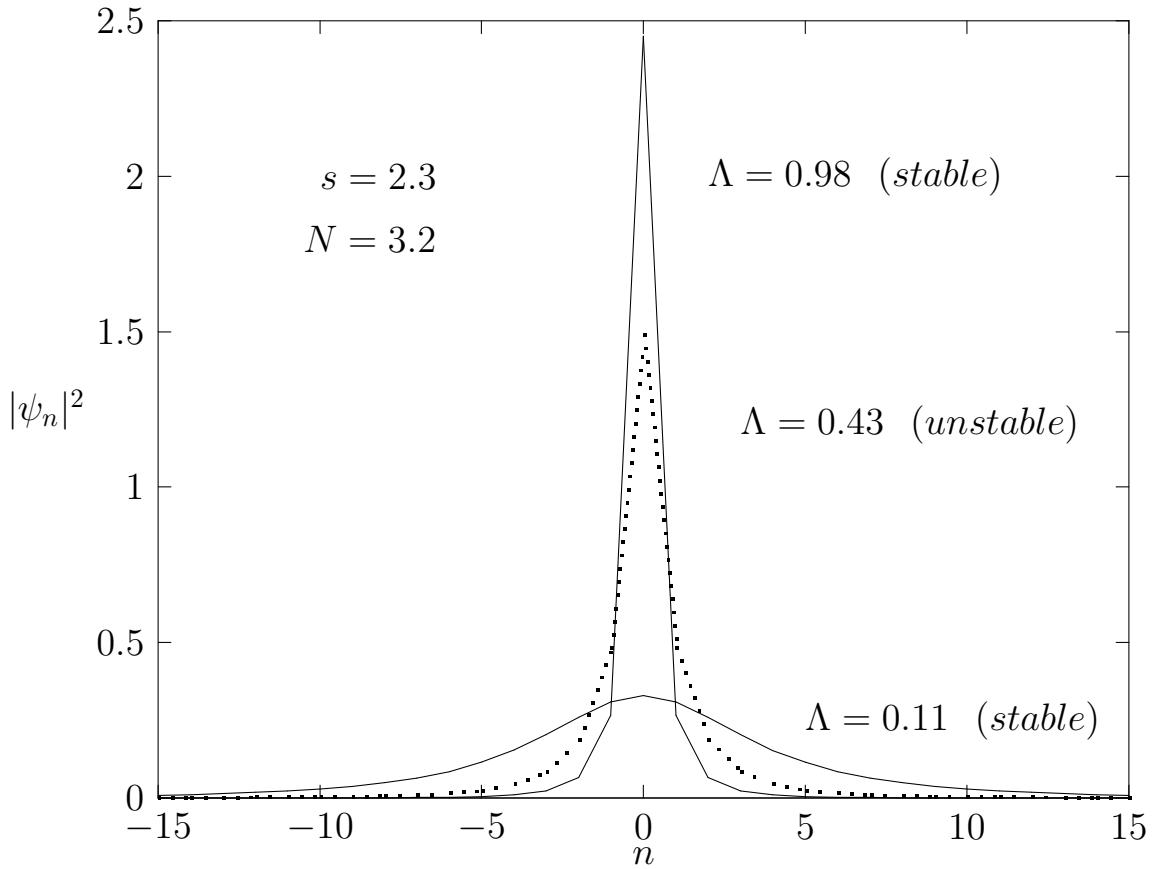


Рис. 3.5. Численно найденные решения системы (3.9), (3.19), существующие при одном и том же значении нормы.

и, воспользовавшись интегральным представлением (3.25), мы получим для кинетической энергии (3.21) выражение

$$T_{eff} = \frac{2N}{\zeta(s)} \left\{ \zeta(s) - F(e^{-\beta}, s-1) \tanh \beta - F(e^{-\beta}, s) \right\} , \quad (3.30)$$

где использована функция Жонкьера [113]

$$F(z, s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^s} . \quad (3.31)$$

Потенциальная энергия (3.5) примет вид

$$U_{eff} = -\frac{N^{\sigma+1}}{\sigma + 1} f_{\sigma} , \quad (3.32)$$

где

$$f_{\sigma} = \tanh^{\sigma+1}(\beta) \coth((\sigma + 1) \beta) . \quad (3.33)$$

Стационарным решениям системы (3.9) соответствуют экстремумы эффективного гамильтониана,

$$H_{eff} = T_{eff} + U_{eff}, \quad (3.34)$$

которые определяются уравнением  $\frac{dH_{eff}}{d\beta} = 0$ , приводящим к равенству

$$N^\sigma = \frac{2(\sigma+1)}{\zeta(s)} \left\{ F(e^{-\beta}, s-2) \tanh \beta + F(e^{-\beta}, s-1) \tanh^2 \beta \right\} \left( \frac{df_\sigma}{d\beta} \right)^{-1} \quad (3.35)$$

При этом спектральный параметр  $\Lambda$  определяется выражением

$$\Lambda = -\frac{1}{N} (T_{eff} + 2U_{eff}), \quad (3.36)$$

На рисунке 3.6 отображена зависимость энергии стационарных решений системы (3.9), (3.19) от нормы,  $N$ , при различных значениях степени нелокальности  $s$  и  $\sigma = 1$ , найденная по формулам (3.34) и (3.35). Как видим, получающаяся поверхность имеет особенность, которая называется в теории катастроф “ласточкин хвост”. Результаты вариационного анализа полностью совпадают качественно (и достаточно близки количественно) к точным, найденным путём численного решения уравнений движения системы при  $\sigma = 1$  и отображённым на рисунках 3.7–3.10. Как и в случае экспоненциальной нелокальности, существует некоторое критическое значение степени нелокальности,  $s_{cr}$ , разделяющее два типа поведения системы. При  $s > s_{cr}$  при каждом значении нормы имеется лишь одно стационарное решение, так что слаболокализованные солитоны плавно переходят в сильнолокализованные и нет особых причин противопоставлять их друг другу. Таким образом, можно утверждать, что основные черты всех дискретных систем, описывающих НУШ с дисперсионным взаимодействием  $J_{n-m}$ , убывающим быстрее чем  $|n-m|^{-s_{cr}}$ , качественно совпадают с полученными в приближении ближайших соседей ( $s = \infty$ ), которое уже давно и интенсивно изучается.

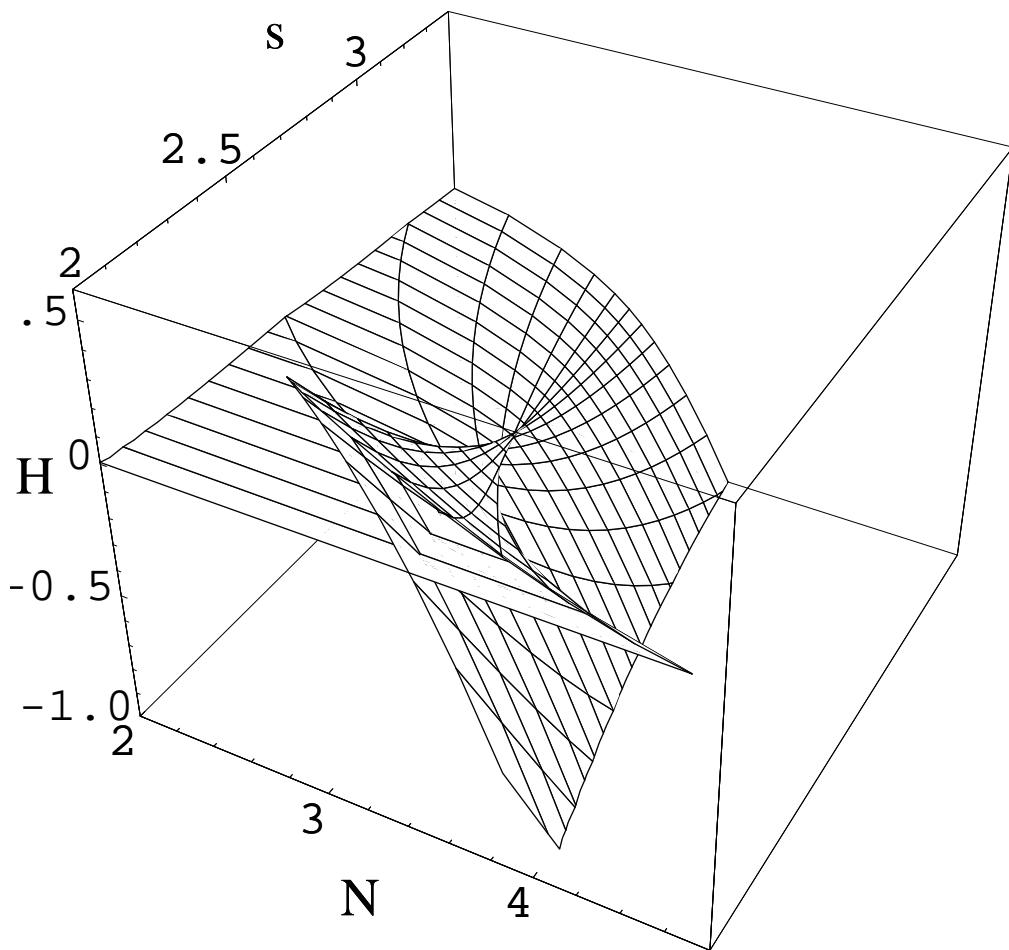


Рис. 3.6. Зависимость энергии стационарных солитонных решений системы (3.9), (3.19) от нормы,  $N$ , при различных значениях степени нелокальности,  $s$ , найденная вариационным методом с использованием экспоненциальной пробной функции (3.28). Имеет место бифуркация типа “ласточкин хвост”.

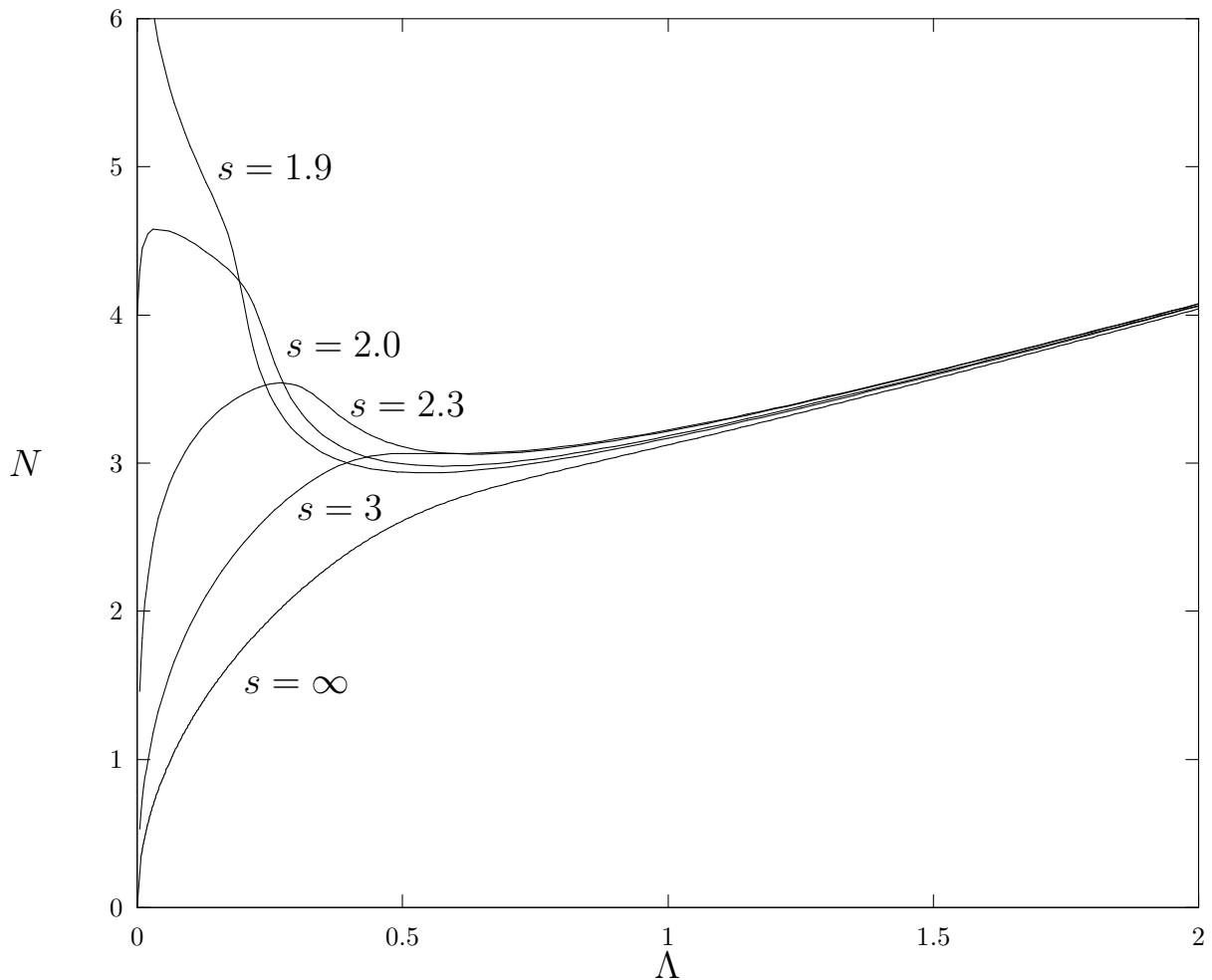


Рис. 3.7. Зависимость нормы численно найденных решений системы (3.9), (3.19) при  $s = 1.9, 2.0, 2.3, 3.0$  и  $\infty$  от спектрального параметра.

Однако при  $2 < s < s_{cr}$  появляется интервал значений нормы, когда в системе имеется три типа солитонных решений. Для исследования устойчивости этих стационарных состояний мы используем подход, развитый в [103]. Положительная определённость  $T$ , определяемого уравнением (3.4) и степенной характер нелинейного слагаемого  $U$  позволяют естественным образом обобщить теорему устойчивости Лидке–Спатчека–Турицина [103] и на рассматриваемый нелокальный случай. В соответствии с этой теоремой, необходимым и достаточным условием устойчивости стационарных

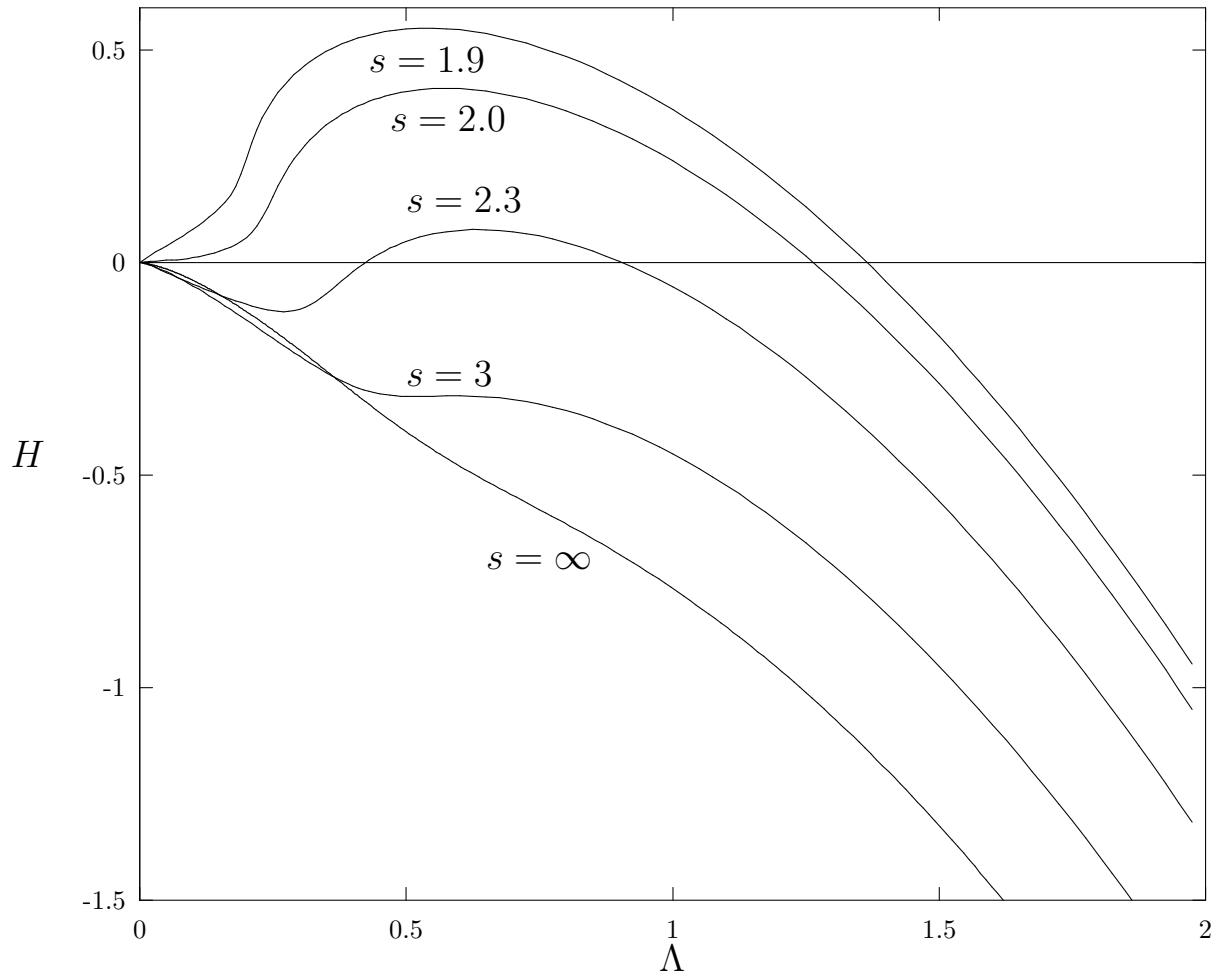


Рис. 3.8. Зависимость энергий численно найденных решений системы (3.9), (3.19) при  $s = 1.9, 2.0, 2.3, 3.0$  и  $\infty$  от спектрального параметра.

состояний является выполнение неравенства

$$\frac{dN}{d\Lambda} > 0 . \quad (3.37)$$

Глядя на график 3.7, мы приходим к заключению, что при  $2 < s < s_{cr}$  в интервале мультистабильности  $[N_l(s), N_u(s)]$  стационарных состояний устойчивы только два из них, — третье же, образующее на поверхности  $H(N, s)$  “крышку” “ласточкина хвоста”, является неустойчивым, ибо для него  $\frac{dN}{d\Lambda} < 0$ . Наиболее ярко различие двух устойчивых солитонов можно видеть из сравнения их ширины, представленного на рис. 3.10. Мы видим, что соли-

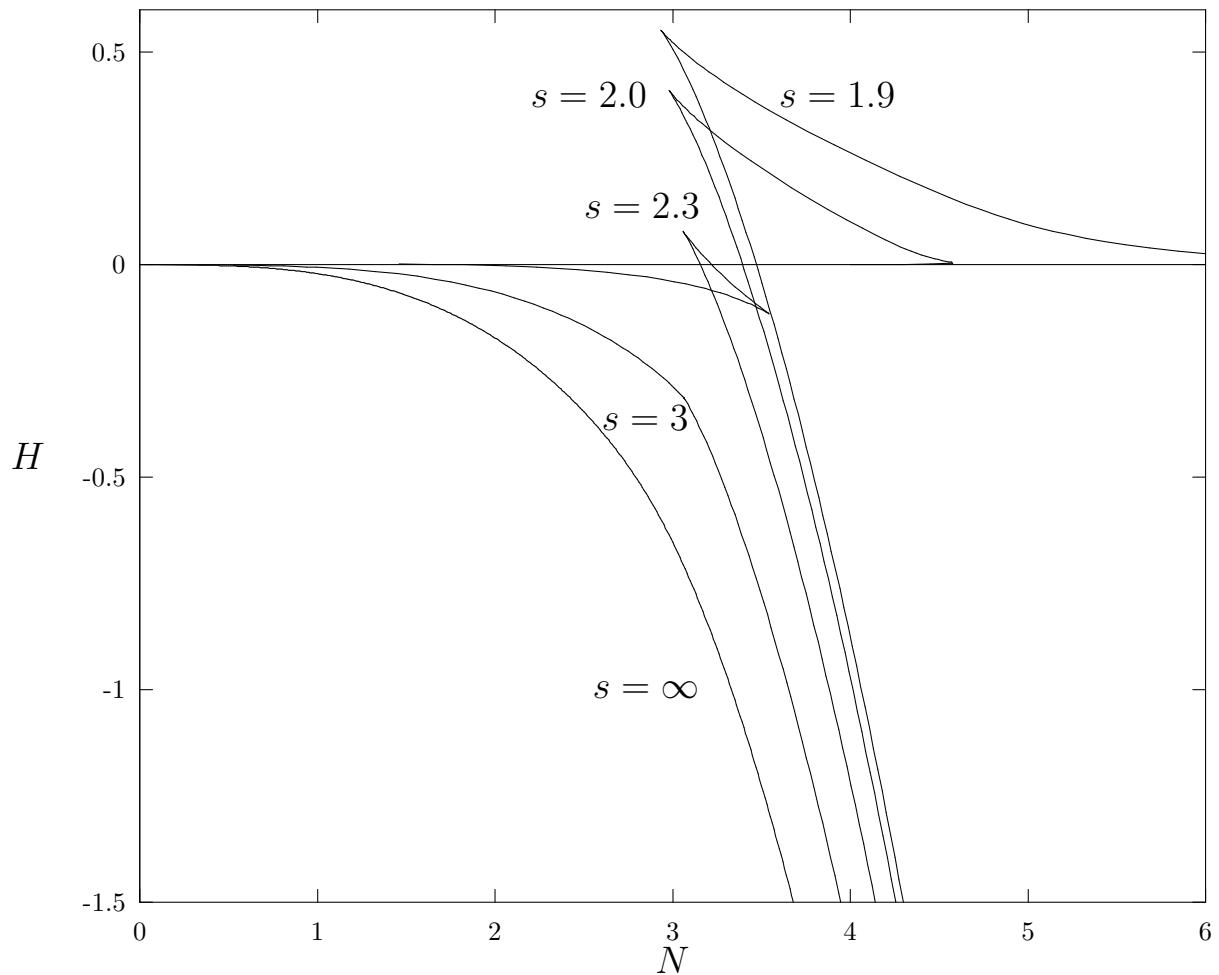


Рис. 3.9. Зависимость энергий численно найденных решений системы (3.9), (3.19) при  $s = 1.9, 2.0, 2.3, 3.0$  и  $\infty$  от нормы.

тоны, существующие при  $0 < N < N_u$ , являются широкими и допускают описание в рамках континуального приближения — это, по сути, давыдовские солитоны. Напротив, солитоны, существующие при  $N_l < N < \infty$ , почти полностью локализованы на одной молекуле. Из-за наличия интервала сосуществования этих солитонов, мы можем говорить о двух *различных типах солитонов*, присущих системе. В целом, ситуация весьма напоминает имеющую место при фазовом переходе жидкость—пар [114], но только вместо пара и жидкости двумя фазами являются слаболокализованное и сильнолокализованное состояния, соответственно. Аналогом температуры

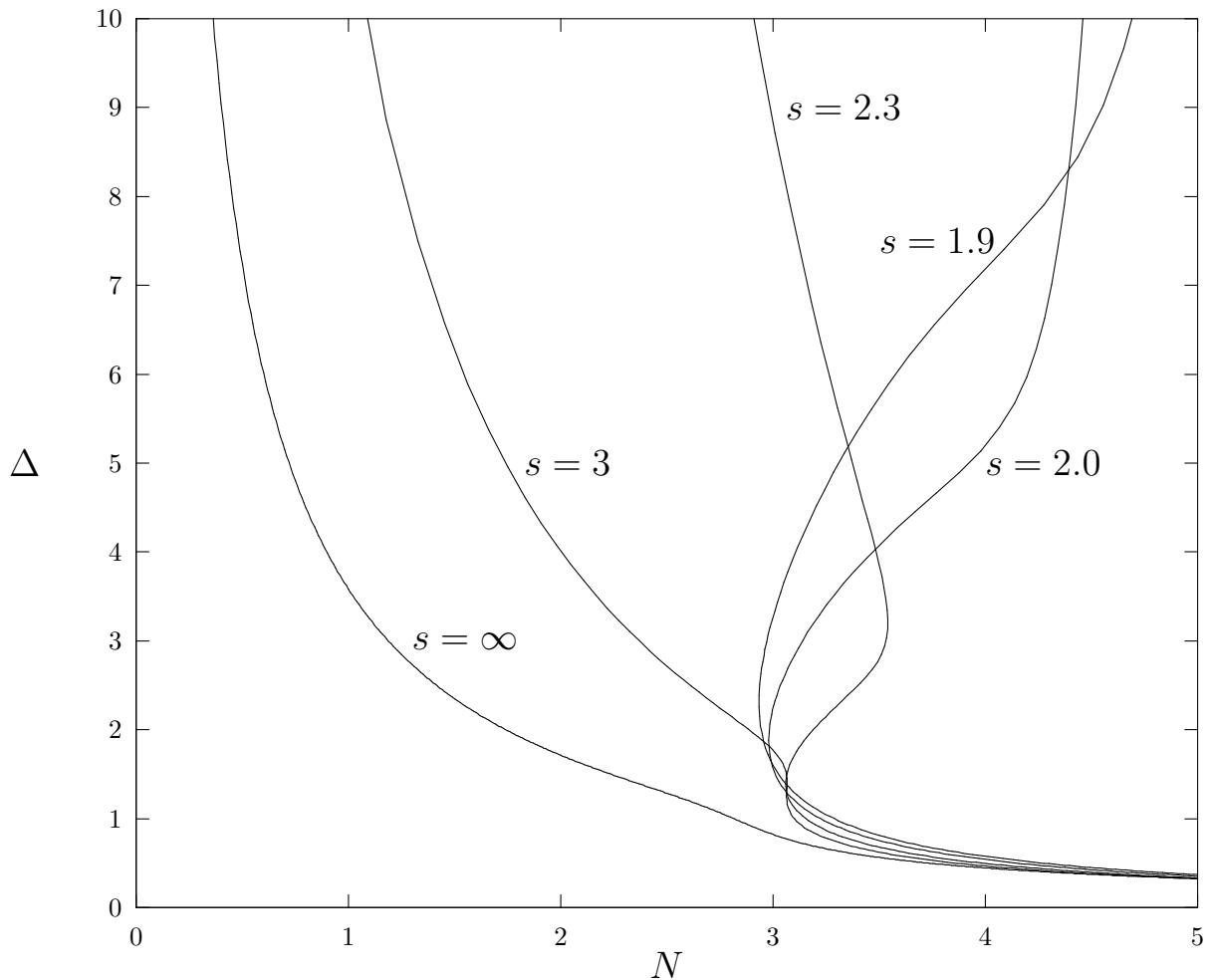


Рис. 3.10. Зависимость ширины численно найденных решений системы (3.9), (3.19) при  $s = 1.9, 2.0, 2.3, 3.0$  и  $\infty$  от нормы.

при этом будет степень нелокальности,  $s$ , с критическим значением  $s_{cr}$ . Численные расчёты дают  $s_{cr} = 3.03$ , так что бистабильность существует и в важном случае диполь–дипольных взаимодействий ( $s = 3$ ). Вариационный метод немного врёт и даёт менее приятное значение  $s_{cr} = 2.72$ .

Вернёмся, однако, к произвольным значениям степени нелинейности  $\sigma$ . Основные свойства системы остаются при этом неизменными, но теперь уже критическое значение степени нелокальности  $s_{cr}$  становится функцией  $\sigma$ . Результаты вариационного подхода, подтверждаемые численными расчётами (см. рис. 3.11), показывают, что  $s_{cr}$  возрастает с ростом  $\sigma$ . В

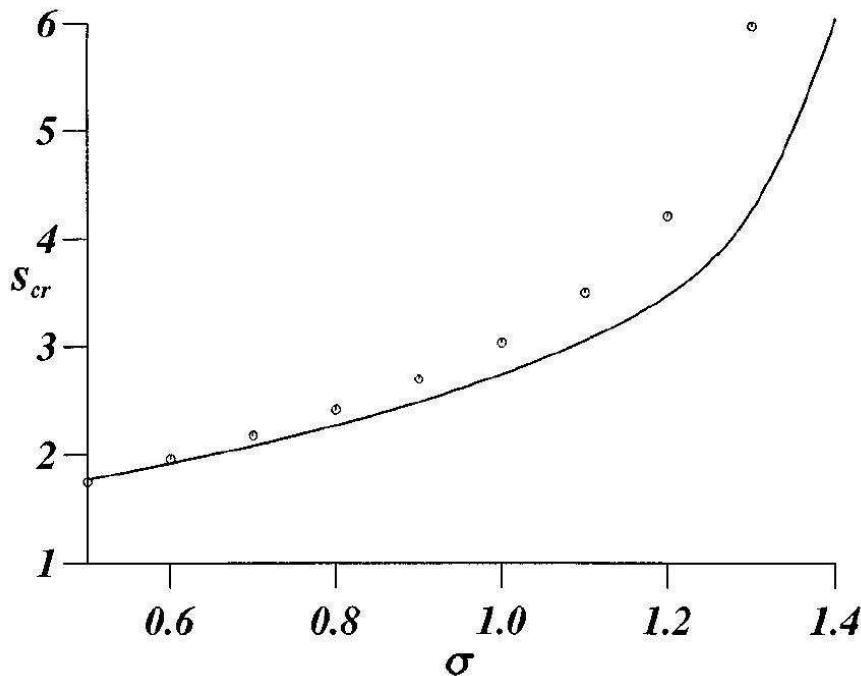


Рис. 3.11. Зависимость критического значения степени нелокальности,  $s_{cr}$ , от степени нелинейности,  $\sigma$ , найденная вариационным методом с использованием экспоненциальной пробной функции (3.28) (сплошная линия) и из численных расчётов (кружки).

частности, для  $\sigma \geq 1.4$  (то есть при превышении значения, при котором слаболокализованный солитон может быть неустойчивым в приближении ближайших соседей [103]), бистабильность имеет место даже для  $s \leq 6$ . Поскольку же результаты работ [102, 111] указывают, что поведение одномерных систем с квинтетной нелинейностью ( $\sigma = 2$ ) качественно такое же, как и поведение двумерных систем с кубической нелинейностью, можно ожидать, что явление бистабильности имеет место в двумерной NLS–модели с квадруполь–квадрупольным взаимодействием ( $s = 5$ ). Впрочем, проводя здесь эту аналогию, мы рискуем крупно навратиться — двумерную задачу необходимо изучать особо и мы намерены заняться этим в будущем из-за большого к ней интереса в связи с плёнками Ленгмюра–Блоджетт.

Принимая во внимание, что для  $\beta < \pi$  функция Жонкьера  $F(e^{-\beta}, s)$  может быть представлена в форме

$$F(e^{-\beta}, s) = \Gamma(1-s)\beta^{s-1} + \sum_{r=0}^{\infty} \zeta(s-r) \frac{(-\beta)^r}{r!}, \quad (3.38)$$

мы найдём из уравнений (3.35)–(3.36), что в пределе широких солитонов, то есть малых значений параметра  $\beta$ , асимптотическое поведение нормы и энергии слаболокализованных солитонов имеет вид

$$N \sim \beta^{(2-\sigma)/\sigma}, \quad H \sim -\beta^{(2+\sigma)/\sigma} \quad \text{для } s > 3, \quad (3.39)$$

и

$$N \sim \beta^{(s-1-\sigma)/\sigma}, \quad H \sim -\text{sign}(s-2)\beta^{s-2+(s-1)/\sigma} \quad \text{для } 1 < s < 3, \quad (3.40)$$

Замечательно, что для  $s > 3$  показатели этих асимптотик не зависят от значения  $s$ , — так что качественно поведение системы не отличается от её поведения в приближении ближайших соседей при *любых значениях*  $\sigma$ . Именно, слаболокализованные солитоны устойчивы только при слабой нелинейности с  $\sigma < 2$ . Если же  $\sigma \geq 2$  то, как указывалось во второй главе, решение либо колапсирует, либо расплывается — так что в дискретном случае устойчивыми будут сильнолокализованное и экситонное состояния.

Более интересна ситуация для  $s < 3$ . Здесь уже показатели асимптотик зависят от степени нелокальности и теперь слаболокализованные солитоны устойчивы при меньших, чем в предыдущем случае, степенях нелинейности  $\sigma < s-1$ . Мы видим, что эти солитоны могут стать неустойчивыми даже в случае обычной нелинейности  $\sigma = 1$ , если только  $s \leq 2$ . Опять же, устойчивыми должны остаться экситонное и сильнолокализованное состояния, причём, что видно из рис. 3.7–3.10, сильнолокализованное состояние будет существовать только при достаточно больших значениях нормы  $N > N_l$ .

Впрочем, изложенное выше асимптотическое рассмотрение, найденное с использованием вариационного метода для частной пробной волновой функции, мягко говоря не вполне убеждает в справедливости сделанных выводов. Поэтому в следующем разделе мы проведём точный анализ устойчивости экситонного состояния.

### 3.5.2. Устойчивость экситонного состояния

*Право, это какое-то свидание вопросов и вопросительных знаков. И поверит ли кто, что в конце концов нам станет казаться, будто проблема эта ещё никогда не была поставлена, будто впервые мы и увидали её, обратили на неё внимание?*

*Фридрих Ницше, “По ту сторону добра и зла”.*

Вспомним о том, что нелокальное НУШ (3.6) всегда обладает экситонным решением

$$\psi_n = \sqrt{\frac{N}{M}} \exp(i\Lambda t) \quad (3.41)$$

где  $N$  – норма, а  $M$  – число молекул в рассматриваемой цепочке. Спектральный параметр  $\Lambda = \left(\frac{N}{M}\right)^\sigma$ .

Ранее мы, с лёгкой руки Бенджамина и Фейра [115, 24], благополучно забывали об этом решении, не сомневаясь в его неустойчивости при  $\sigma < 2$ . Но результаты предыдущего раздела сильно поколебали эту уверенность и теперь мы вновь хотим поставить на обсуждение вопрос об устойчивости экситонного решения, но уже при наличии степенной дисперсионной нелокальности (3.19).

Рассматривая экситонную волновую функцию, слегка возмущённую наличием малых действительных поправок  $a_n(t)$  и  $\theta_n(t)$

$$\psi_n = \sqrt{\frac{N}{M}}(1 + a_n) \exp(i\Lambda t + i\theta_n), \quad (3.42)$$

мы можем разделить, в линейном приближении по  $a_n$  и  $\theta_n$ , комплексное уравнение (3.6) на два действительных

$$\partial_t a_n + \sum_{m \neq n} J_{n-m}(\theta_m - \theta_n) = 0 , \quad (3.43)$$

$$\partial_t \theta_n - \Lambda(2\sigma + 1)a_n - \sum_{m \neq n} J_{n-m}(a_m - a_n) = 0 , \quad (3.44)$$

Вследствие линейности этой системы, мы можем искать её решение со следующей зависимостью по  $n$

$$a_n \sim \theta_n \sim \exp(iqn) . \quad (3.45)$$

В этом случае справедливо равенство

$$\sum_{m \neq n} J_{n-m}(\theta_m - \theta_n) = -\theta_n \mathcal{L}(q) , \quad (3.46)$$

где спектральная функция  $\mathcal{L}(q)$  определена выражением (3.22). В результате система (3.43)–(3.44) принимает вид

$$\partial_t a_n - \mathcal{L}(q)\theta_n = 0 , \quad (3.47)$$

$$\partial_t \theta_n - \Lambda(2\sigma + 1)a_n + \mathcal{L}(q)a_n = 0 , \quad (3.48)$$

откуда уже легко находится

$$\partial_t^2 a_n + \Omega^2(q)a_n = 0 , \quad (3.49)$$

при

$$\Omega^2(q) = \mathcal{L}(q)(\mathcal{L}(q) - \Lambda(2\sigma + 1)) . \quad (3.50)$$

Как видим, если имеются такие значения  $q$ , для которых  $\Omega^2(q) < 0$ , то возмущения с этими волновыми векторами будут экспоненциально расти со временем и, таким образом, экситонное состояние будет неустойчивым. Чтобы понять, какая же ситуация имеет место в нашем случае, вспомним

формулу (3.27). С учётом следующей из неё положительности  $\mathcal{L}(q)$ , критерий устойчивости экситонного состояния принимает вид

$$\mathcal{L}(q) > \Lambda(2\sigma + 1) \quad \text{для всех } q . \quad (3.51)$$

На первый взгляд, эта неравенство доказывает неустойчивость экситонного состояния, ибо оно нарушается при любых значениях  $1 < s < 3$  для малых  $q$ . Однако вспомним, что наша система дискретна и, следовательно, она имеет *дискретный набор* значений волнового вектора

$$q_n = 2\pi \frac{n}{M} \quad , \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots , \quad (3.52)$$

так что критерий устойчивости немного модифицируется:  $\Omega^2(q_n) > 0$  для всех целых  $n$ . Поскольку же экситонное состояние “больно” на неустойчивость именно при малых  $q$ , критерий можно переписать в более простом виде

$$\mathcal{L}(q_1) \equiv \text{const} \cdot M^{1-s} > \Lambda(2\sigma + 1) \equiv \text{const} \cdot (N/M)^\sigma . \quad (3.53)$$

Легко видеть, что при  $s < \sigma + 1$  это неравенство выполняется для всех значений нормы  $N$  (в приближении бесконечно длинной цепочки  $M \rightarrow \infty$ , разумеется). Итак, в длинных молекулярных цепочках экситон устойчив при  $s < \sigma + 1$  и неустойчив при  $s > \sigma + 1$ , независимо от значения нормы  $N$ .

Пограничный случай  $s_{ex} = \sigma + 1$  немножко богаче. Для него устойчивость экситона зависит от значения  $N$ : он устойчив, если норма мала и неустойчив, если велика. Рассмотрим более подробно случай  $\sigma = 1$ . Для него  $s_{ex} = 2$  и мы можем воспользоваться точным выражением (3.26) для  $\mathcal{L}(q)$  и переписать неравенство (3.53) в виде

$$\frac{12}{M} - \frac{12}{M^2} > \frac{3N}{M} , \quad (3.54)$$

или же

$$N < N_{cr} \equiv 4 - \frac{4}{M} . \quad (3.55)$$

Таким образом, экситонное состояние устойчиво при  $N < N_{ex}$  и неустойчиво при  $N > N_{ex}$ .

### 3.5.3. Квази–континуальное приближение

*Из всех теорий хороша только та, которая помогает выйти за пределы.*

*Андре Жид.*

Теперь нам бы хотелось обсудить квази–континуальный предел дискретного нелокального НУШ (3.3)–(3.5) с произвольными степенями нелокальности,  $s$ , и нелинейности,  $\sigma$ . Интересуясь случаем, когда характерный размер возбуждения намного больше чем расстояние между соседними молекулами, мы можем заменить  $\psi_n(t)$  функцией  $\psi(x, t)$  непрерывной переменной  $x$  и, воспользовавшись формулами суммирования Эйлера–Маклорена [117], переписать потенциальную энергию (3.5) в интегральном виде

$$U = -\frac{1}{\sigma + 1} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^{2(\sigma+1)}. \quad (3.56)$$

Поскольку в рассматриваемом нами континуальном пределе основной вклад будут давать компоненты Фурье–образа волновой функции с малыми волновыми числами ( $k \ll 1$ ), мы можем безболезненно расширить пределы интегрирования в выражении (3.21) для кинетической энергии,  $T$ , на всю ось  $k$  и получить в результате

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \mathcal{L}(k) |\Phi(k, t)|^2 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy [\partial_x \psi^*(x, t)] q(x - y) [\partial_y \psi(y, t)], \end{aligned} \quad (3.57)$$

где Фурье–образ  $Q(k)$  ядра  $q(x)$  задаётся выражением

$$Q(k) = \frac{1}{k^2} \mathcal{L}(k). \quad (3.58)$$

Исходя из уравнений (3.56) и (3.57), мы приходим к выводу, что динамика возбуждения описывается интегро-дифференциальным нелинейным уравнением Шрёдингера вида

$$i\partial_t\psi + \partial_x (\hat{q}\partial_x\psi) + |\psi|^{2\sigma}\psi = 0 , \quad (3.59)$$

где  $\hat{q}$  является оператором, действие которого в пространстве волнового вектора  $k$  определяется равенством

$$(\hat{q}\psi)(k) = Q(k)\Phi(k) . \quad (3.60)$$

Ядро  $q(x)$  уравнения (3.57) можно рассматривать как обобщенную обратную эффективную массу возбуждения. Из уравнений (3.22) и (3.58) мы получим, что его Фурье-образ может быть представлен в форме

$$Q(k) = \frac{2}{k^2} \operatorname{Re} \left( 1 - \frac{F(e^{ik}, s)}{\zeta(s)} \right) , \quad (3.61)$$

где функция Жонкьера  $F(z, s)$  определена уравнением (3.31). Воспользовавшись приближением (3.38) для функции Жонкьера, мы получим в длинноволновом пределе  $k \ll 1$  следующие выражения для  $Q(k)$

$$Q(k) = \frac{\zeta(s-2)}{2\zeta(s)} + \mathcal{O}(k^{s-3}) , \quad \text{при } s > 3 , \quad (3.62)$$

$$Q(k) = \frac{1}{2\zeta(3)} (3 + \ln(\frac{1}{k^2})) + \mathcal{O}(k^2) , \quad \text{при } s = 3 , \quad (3.63)$$

$$Q(k) = -\frac{\pi}{\Gamma(s)\zeta(s)\cos(\pi s/2)} |k|^{s-3} + \mathcal{O}(k^0) , \quad \text{при } 1 < s < 3 . \quad (3.64)$$

Как видно из уравнения (3.62), для  $s > 3$  эффективная масса  $m = \frac{\zeta(s)}{\zeta(s-2)}$  постоянна и, таким образом, уравнение (3.59) принимает вид обычного НУШ с квадратичным законом дисперсии

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + |\psi|^{2\sigma}\psi = 0 . \quad (3.65)$$

При  $s = 3$ , соответствующем диполь–дипольному дисперсионному взаимодействию, эффективная масса становится нелокальной, — но эта нелокальность довольно слаба, поскольку функция обратной массы  $Q(k)$ , задаваемая уравнением (3.63), является логарифмической функцией  $k$ . В противоположность этому, при  $1 < s < 3$  дальнодействующие эффекты становятся действительно очень существенными и, например, в случае  $s = 2$ , когда, в соответствии с (3.64)  $\mathcal{L} \simeq \frac{6}{\pi} |k|$ , интегро-дифференциальное уравнение (3.59) принимает более конкретный вид

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{6}{\pi} \mathcal{H}\left\{\frac{\partial \psi}{\partial x}\right\} + |\psi|^{2\sigma} \psi = 0, \quad (3.66)$$

где введено преобразование Гильберта  $\mathcal{H}\{f(x)\}$  функции  $f(x)$ , определяемое равенством

$$\mathcal{H}\{f(x)\} \equiv \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{f(y)}{y - x}, \quad (3.67)$$

в котором интеграл берётся в виде главного значения Коши.

В дальнейшем, мы будем ссылаться на уравнение (3.66) как на “Гильберт–НУШ”. В частном случае кубической нелинейности  $\sigma = 1/2$  стационарное солитонное решение этого уравнения можно найти аналитически — оно имеет вид алгебраического солитона

$$\psi(x, t) = \frac{N}{6} \left(1 + \left(\frac{\pi N x}{72}\right)^2\right)^{-1} e^{i N t / 3}. \quad (3.68)$$

Наши численные расчёты показывают, что при  $\sigma = 1$  и  $s < 3$ , и слабо– и сильнолокализованные солитоны также имеют алгебраические, а не экспоненциальные, хвосты, в отличие от случая  $s > 3$ . Интересно, что, как было показано в работах [120, 121], стационарными решениями в виде алгебраических солитонов обладает и НУШ вида

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - 3|\psi|\psi + 2|\psi|^2\psi = 0, \quad (3.69)$$

Однако такое его решение является неустойчивым [122].

Поэтому, очень важно теперь рассмотреть вопрос устойчивости солитонных решений уравнения (3.59). Воспользуемся тем, что его стационарные решения вида

$$\psi(x, t) = \phi(x, \Lambda) e^{i \Lambda t} \quad (3.70)$$

являются стационарными точками гамильтониана  $H = T + U$  при фиксированном значении нормировки

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2, \quad (3.71)$$

и введём масштабное преобразование

$$\phi_p(x, \Lambda) = p^{1/2} \phi(p x, \Lambda), \quad (3.72)$$

сохраняющее значение нормы. По отношению к этому преобразованию, гамильтониан  $H$  становится функцией параметра  $p$ , имеющей экстремум при  $p = 1$ . Чтобы судить об устойчивости решения, мы должны определить, чему соответствует этот экстремум: максимуму или минимуму. Подставляя функцию (3.72) в уравнения (3.56) и (3.57), и учитывая (3.61), мы получим

$$U(p) \equiv -\frac{1}{\sigma+1} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\phi_p(x, \Lambda)|^{2(\sigma+1)} = p^\sigma U(p=1),$$

$$T(p) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy (\partial_x \phi_p(x)) q(x-y) \partial_y \phi_p(y) = p^{s-1} T(p=1). \quad (3.73)$$

Теперь, замечая, что равенство  $\frac{dH(p)}{dp}|_{p=1} = 0$  может быть расписано в виде  $(s-1)T(p=1) = -\sigma U(p=1)$ , мы приходим к уравнению

$$\frac{d^2 H(p)}{dp^2}|_{p=1} = (s-1)(s-\sigma-1)T(p=1). \quad (3.74)$$

Поскольку же величина  $T(p=1)$  является положительно-определенной, мы можем заключить из этого уравнения, что при  $s < \sigma + 1$ , функция  $H(p)$  при  $p = 1$  имеет максимум и, таким образом, слаболокализованный

солитон  $\phi(x, \Lambda)$  является неустойчивым. Устойчивым же, как было показано в предыдущем разделе, будет при этом экситонное состояние.

Что касается Гильберт–НУШ (3.66), мы приходим к выводу, что его солитонные решения будут неустойчивыми лишь при  $\sigma \geq 1$ . Так что алгебраический солитон (3.68) должен быть устойчив и численные расчёты убеждают нас в этом окончательно.

### 3.6. Заключение

В данной главе было предложено и исследовано новое дискретное нелокальное нелинейное уравнение Шрёдингера со степенной дисперсионной нелокальностью, которое позволяет описывать процессы локализации и переноса энергии в молекулярных цепочках типа белков и некоторых полимеров. Показано, что поведение любого дискретного НУШ, дисперсионное взаимодействие которого между молекулами  $n$  и  $m$  ослабляется быстрее, чем  $|n - m|^{-s_{cr}}$ , качественно совпадает с хорошо изученным дискретным НУШ, учитывающим взаимодействие лишь соседних молекул. В случае же, когда дисперсионное взаимодействие ослабляется медленнее, чем  $|n - m|^{-s_{cr}}$ , существует интервал значений нормы, для которого в системе могут существовать два типа солитонов: слабо- и сильнолокализованные. Существование явления бистабильности в модели НУШ с нелокальной дисперсией является результатом соревнования между двумя масштабами длины системы: расстояния между молекулами, с одной стороны, и эффективного радиуса нелокального взаимодействия, с другой. Учёт тепловых флуктуаций системы должен привести к интересным экспериментально наблюдаемым эффектам, связанным с выбросами энергии из-за столкновений и взаимопревращений этих двух типов солитонов.

Показано, что если дисперсионное взаимодействие ослабляется мед-

леннее, чем  $|n - m|^{-s_{ex}}$ , где  $s_{ex} < s_{cr}$ , то слаболокализованное солитонное состояние исчезает, а устойчивым становится экситонное состояние, которое является значительно менее эффективным при транспорте энергии на далёкие расстояния [1, 2]. Учитывая, что эффективное значение показателя степени нелокальности  $s$  сильно изменяется при конформационных переходах молекулярной цепочки, можно ожидать резкого изменения основного состояния цепочки и, таким образом, её транспортных свойств в результате такого перехода. Так, например, для белка с диполь–дипольным резонансным межпептидным взаимодействием,  $s = 3$  для конформации  $\alpha$ –спирали и, как отмечалось во введении,  $s \simeq 1.9$  в конформации клубка. Поэтому, устойчивость солитонного состояния в конформации  $\alpha$ –спирали должна смениться устойчивостью экситонного состояния в конформации клубка.

Мы рассмотрели также квази-континуальную версию нелокального НУШ и показали, что оно переходит в обычное НУШ для  $s > 3$  и редуцируется, при  $s = 2$ , к уравнению, названному нами “Гильберт–НУШ” и являющемуся близким аналогом уравнения Бенджамина–Оно в теории волн на глубокой воде. При одном частном значении степени нелинейности Гильберт–НУШ имеет решение в виде алгебраического солитона. Получены критерии устойчивости для слаболокализованного солитонного стационарного состояния. Показано, что алгебраический солитон устойчив.

## Основные результаты

*Вовсе не легко отыскать книгу, которая научила нас столь же многому, как книга, написанная нами самими.*

*Фридрих Ницше, “Злая мудрость”.*

В заключение, перечислим основные результаты, представленные в диссертации и вынесенные на защиту:

1. Исследован характер взаимодействия акустического и давыдовского солитонов в ангармонических молекулярных цепочках. Показано, что имеется такое критическое значение ангармонизма, при котором взаимодействие между ними фактически отсутствует. При более слабом ангармонизме солитоны отталкивают друг друга, а при более сильном ангармонизме они начинают притягиваться и образуют близероподобное связанное состояние. Исходя из оценок параметров реальных систем, мы делаем вывод, что такое связанное состояние может возникать в задаче нелинейного транспорта заряда в белке в виде *электросолитона*. Оно должно при этом резонансно взаимодействовать с переменным электрическим полем и приводить, таким образом, к экспериментально наблюдаемым эффектам.
2. Предложено одномерное континуальное нелокальное нелинейное уравнение Шрёдингера, адекватно описывающее системы с насыщающимся законом дисперсии плоских волн. Подробно изучены его солитонные решения и показано, что эти решения существуют только в конечном интервале значений нормы волновой функции, причём если эта норма близка к максимально допустимой, имеются две ветви стаци-

онарных солитонных решений, одна из которых является неустойчивой. При этом форма солитона изменяется, при увеличении значения нормы, от колоколообразной до заострённой. Если норма превышает максимальное значение, то стационарного решения не существует и любой достаточно сильно локализованный волновой пакет коллапсирует. Показано, что вследствие галилеевской неинвариантности системы, в ней отсутствуют стационарные движущиеся солитоны, — движущийся солитон будет излучать позади себя хвост с длиной волны, пропорциональной скорости солитона.

3. Предложено одномерное дискретное нелокальное нелинейное уравнение Шрёдингера со степенным характером дисперсионной нелокальности, позволяющим описывать диполь-дипольное и другие виды мультипольного резонансного межмолекулярного взаимодействия и учитывать при этом, в рамках фрактальной модели, пространственную конфигурацию молекулярной цепочки. Показано, что благодаря конкуренции дискретности и нелокальности в системе существуют два резко отличные друг от друга типа солитонов, — слабо- и сильнолокализованные. При быстром ослаблении с расстоянием нелокального межмолекулярного взаимодействия, переход от одного типа солитонов к другому происходит плавно и свойства системы не отличаются от таковых в модели ближайших соседей. Если же нелокальное взаимодействие ослабляется с расстоянием достаточно медленно, то имеется интервал значений нормы, где сосуществуют оба типа солитонов и система является, таким образом, бистабильной. Существование явления бистабильности в модели НУШ с нелокальной дисперсией является результатом соревнования между двумя масштабами длины системы: расстояния между молекулами, с одной стороны, и

эффективного радиуса нелокального взаимодействия, с другой.

4. Показано, что при уменьшении показателя степени нелокальности дискретного НУШ, слаболокализованное солитонное состояние вначале сильно уширяется, а затем исчезает, так что устойчивым становится экситонное состояние. Учитывая, что эффективное значение показателя степени нелокальности изменяется при конформационных переходах молекулярной цепочки, можно ожидать резкого изменения основного состояния цепочки и, таким образом, её транспортных свойств в результате такого перехода.
5. Рассмотрен квази-континуальный вариант нелокального дискретного НУШ и показано, что это уравнение переходит в обычное НУШ при  $s > 3$  и редуцируется к уравнению “Гильберт–НУШ”, близкому аналогу уравнения Бенджамина–Оно, при  $s = 2$ . Показано, что при одном частном значении степени нелинейности Гильберт–НУШ имеет решение в виде алгебраического солитона. Получены критерии устойчивости для слаболокализованного солитонного стационарного состояния и показано, что алгебраический солитон устойчив.

## Благодарность

*Если ты хочешь доставить себе радость, то подумай о добродетелях людей, с которыми ты живёшь.*

*Марк Аврелий, “Наедине с собой. Размышления.”*

Я глубоко признателен моему научному руководителю Юрию Борисовичу Гайдидею за его неизменную поддержку, постоянное внимание и зажигающий интерес к совместным исследованиям. Мне хочется поблагодарить профессора Питера Христиансена и его аспиранта Кима Расмуссена за плодотворное сотрудничество и поддержку, позволившую мне принять участие в Международной конференции по сложной динамике в пространственно распределённых системах, проходившую в Копенгагене в сентябре 1995 года. Я очень благодарен также профессору Францу Мертенсу, организовавшему мне месяц интересной работы в Байройтском университете, и его аспирантам Роланду Гуссу и Андреасу Неуперу за их дружеское расположение и помошь в освоении мира больших компьютеров. Наконец, я искренне признателен сотрудникам отделов теории многочастичных систем и теории нелинейных явлений в конденсированных средах Института теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины за полезные дискуссии и ценные замечания, но более всего за тот дух неподдельной увлечённости физикой, всё ещё царящий у нас, без постоянного ощущения которого всякая плодотворная научная работа была бы почти немыслимой.

## Литература

1. А.С. Давыдов, Биология и квантовая механика, Киев: Наукова думка (1979) 296 стр.
2. А.С. Давыдов, Солитоны в молекулярных системах, 2-е изд., Киев: Наукова думка (1988) 304 стр.
3. А.С. Давыдов, Влияние электрон–фононного взаимодействия на движение электрона в одномерной молекулярной цепи, ТМФ **40** (1979) 408–421.
4. L.D. Landau, Über die Bewegung der Electronen in Kristallgotter, Phys. Z. Sowjetunion **3** (1933) 664–666.
5. С.И. Пекар, Автолокализация электрона в диэлектрической инерционно–поляризующейся среде, ЖЭТФ **16** (1946) 335–340.
6. А.С. Давыдов и А.А. Еремко, Радиационное время жизни солитонов в молекулярных кристаллах, Укр. Физ. Журн. **22** (1977) 881–892.
7. R.J. Glauber, The quantum theory of optical coherence, Phys. Rev. **130** (1963) 2529–2539.
8. R.J. Glauber, Coherent and incoherent states of the radiation field, Phys. Rev. **131** (1963) 2766–2788.
9. Davydov's soliton revisited, Eds. P.L. Christiansen and A.C. Scott, NATO ASI Series B: Physics Vol. 243, New York: Plenum Press (1990).
10. Alwyn Scott, Davydov's soliton, Phys. Rep. **217** (1992) 1–67.

11. А.С. Давыдов и А.В. Золотарюк, Дозвуковые и сверхзвуковые солитоны в квазиодномерных молекулярных структурах, Киев (1983) 1–21 (Препринт АН УССР, Ин-т теор. физики; 83-117Р).
12. A.S. Davydov and A.V. Zolotariuk, Subsonic and supersonic solitons in nonlinear molecular chains, *Phys. Scr.* **30** (1984) 426–430.
13. M. Toda, Wave propagation in anharmonic lattices, *J. Phys. Soc. Japan* **23** (1967) 501–520.
14. M. Toda and M.A. Waddati, Solitons and two solitons in an exponential lattice and related equation, *J. Phys. Soc. Japan* **34** (1973) 18–25.
15. 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.
16. 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.
17. 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.
18. 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).
19. Yu.B. Gaididei, S.F. Mingaleev, P.L. Christiansen, and K.Ø. Rasmussen, Nonlocal Dispersive Interactions in Discrete Nonlinear Schrödinger

- Equation, International Conference “Fluctuations, Nonlinearity and Disorder”, Heraclion, Greece (30.09–4.10, 1996) p. 47.
20. Yu.B. Gaididei, S.F. Mingaleev, P.L. Christiansen, and K.Ø. Rasmussen, Effects of Nonlocal Dispersive Interactions on Self-Trapping Excitations, Phys. Rev. E (1997), in press.
  21. С.Ф. Мінгалеєв, Зв'язаний стан Давидівського та Акустичного солітонів в сильноангармонічних ланцюжках, Праці Всеукраїнської конференції молодих вчених (фізики), Київський університет, (квітень 1994) 17–24.
  22. Yu.B. Gaididei and S.F. Mingaleev, Non-local nonlinear Schrödinger equation, International workshop on statistical physics and condensed matter theory, Programme and Abstracts, Lviv, Ukraine (11–14 September, 1995) p. 80.
  23. S.F. Mingaleev, Non-local Nonlinear Schrödinger Equation (P33); 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 (O19); Book of Abstracts, Copenhagen Conference on Complex Dynamics in Spatially Extended Systems, Niels Bohr Institute, Denmark (27–30 September, 1995).
  24. А. Ньюелл, Солитоны в математике и физике, Пер. с англ., Москва: Мир (1989), 326 стр.
  25. А.С. Давыдов и А.В. Золотарюк, Электроны и экситоны в нелинейных молекулярных цепочках, Киев (1982) 1–32 (Препринт АН УССР, Ин-т теор. физики; 82-133Р).

26. A.S. Davydov and A.V. Zolotariuk, Autolocalized collective excitations in molecular chains with cubic anharmonicity, *Phys. Stat. Sol. (b)* **115** (1983) 115–125.
27. K. Nishikawa, H. Hojo, K. Mima and H. Ikezi, Coupled Nonlinear Electron–Plasma and Ion–Acoustic Waves, *Phys. Rev. Lett.* **33** (1974) 148–151.
28. N. Yajima and J. Satsuma, Soliton Solutions in a Diatomic Lattice System, *Progr. of Theor. Phys.* **62** (1979) 370-378.
29. J.L. Mustre, S.D. Conradson, I. Batistić and A.R. Bishop, Correlation between axial-oxygen anharmonicity and  $T_c$  in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  and related compounds, *Phys. Rev. B* **44** (1991) 2422–2425.
30. L.T. Zhang, , *Phys. Rev. A* **35** (1987) 886.
31. V. Muto, A.C. Scott and P.L. Christiansen, A Toda lattice model for DNA: thermally generated solitons, *Physica D* **44** (1990) 75–91.
32. V. Muto, P.S. Lomdahl and P.L. Christiansen, Two-dimensional discrete model for DNA dynamics: Longitudinal wave propagation and denaturation, *Phys. Rev. A* **42** (1990) 7452–7458.
33. O.H. Olsen, P.S. Lomdahl and W.C. Kerr, , *Phys. Lett. A* **136** (1989) 402.
34. P.L. Christiansen, V. Muto and S. Rionero, , *Chaos, Solitons and Fractals* **2** (1992) 45.
35. G.C. Huth, F. Gutmann and G. Vitiello, , *Phys. Lett. A* **140** (1989) 339.
36. P.L. Christiansen, S. Pagano and G. Vitiello, The lifetime of coherent excitations in Langmuir–Blodgett Scheibe aggregates, *Phys. Lett. A* **154** (1991) 381–384.

37. D. Moebius and H. Kuhn, , *Isr. J. Chem* **18** (1979) 382.
38. D. Moebius and H. Kuhn, Energy transfer in monolayers with cyanine dye Sceibe aggregates, *J. Appl. Phys.* **64** (1988) 5138–5141.
39. P.L. Christiansen, J.C. Eilbeck, V.Z. Enolski and Yu.B. Gaididei, On ultrasonic Davydov solitons and the Hénon-Heiles system, *Phys. Lett. A* **166** (1992) 129–134.
40. Ю.Б. Гайдидей, Дж.К. Илбек, П.Л. Христиансен и В.З. Энольский, Ультразвуковые солитоны и система Энона-Элиса, *Укр. Физ. Журн.* **37** (1992) 1778–1785.
41. M. Hénon and C. Heiles, The applicability of the third integral of motion; some numerical experiments, *Astron. J.* **69** (1964) 73–79.
42. A.V. Zolotaryuk, K.H. Spatschek and A.V. Savin, Bifurcation Scenario of the Davydov–Scott Self-Trapping Mode, *Europhysics Lett.*, **31** (1995) 531–536.
43. T.C. Bountis, H. Segur and F. Vivaldi, Integrable Hamiltonian systems and the Painlevé property, *Phys. Rev. A* **25** (1982) 1257–1264.
44. A.P. Fordy, The Hénon–Heiles system revisited, *Physica D* **52** (1991) 204–210.
45. A.C. Newell, M. Tabor and Y.B. Zeng, , *Physica A* **29** (1987) 1–30.
46. V.Z. Enolskii, A.Yu. Kondratiev and N.A. Kostev, Lax Representation for Some Dynamical Systems, Bielefeld (1991) – (Prepr. Bielefeld Univ.).
47. Y. Aizawa and N. Saito, , *J. Phys. Soc. Japan* **32** (1972) 1636.

48. Y.F. Chang, M. Tabor and J. Weiss, Analytic structure of the Henon–Heiles Hamiltonian in integrable and nonintegrable regimes, *J. Math. Phys.* **23** (1982) 531–538.
49. А. Лихтенберг и М. Либерман, Регулярная и стохастическая динамика, пер. с англ., Москва: Мир (1984) 528 стр.
50. Е.Т. Уиттекер, Аналитическая динамика, пер. с англ., Москва - Ленинград: ОНТИ (1937) 500 стр.
51. Дж.Л. Лем, Введение в теорию солитонов, пер. с англ., Москва: Мир (1983) 294 стр.
52. V.K. Mel'nikov, Exact solutions of the Korteweg – de Vries equation with a self-consistent source, *Phys. Lett. A* **128** (1988) 488-492.
53. V.K. Mel'nikov, Integration method of the Korteweg – de Vries equation with a self-consistent source, *Phys. Lett. A* **133** (1988) 493-496.
54. J.R. Dormand and P.J. Prince, A family of embedded Runge-Kutta formulae, *J. Comp. Appl. Math.* **6** (1980) 19–26.
55. Э. Хайрер, С. Нёрсетт, Г. Ваннер, Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи, Пер. с англ., Москва: Мир (1990) 512 стр.
56. P. Perez, Collisions between a Davydov soliton and Lattice Solitons, *Phys. Lett. A* **136** (1989) 37–40.
57. V.N. Kadantsev, V.N. Lupichev and A.V. Savin, , *Phys. Stat. Sol. (b)* **183** (1994) 193.
58. И.И. Украинский и С.Л. Мирнов, О природе зоны проводимости в полипептидных цепочках, *Теор. и Эксп. Хим.* **15** (1979) 144–151.

59. Nonlinear Coherent Structures in Physics and Biology, Eds. K.H. Spatschek and F.G. Mertens, NATO ASI Series B: Physics Vol. 329, New York: Plenum Press (1994).
60. Future Directions of Nonlinear Dynamics in Physical and Biological Systems, Eds. P.L. Christiansen, J.C. Eilbeck and R.D. Parmentier, New York: Plenum Press (1993).
61. А.С. Давыдов, Теория молекулярных экситонов, Москва: Наука (1968) 296 стр.
62. Р. Додд, Дж. Эйлбек, Дж. Гибbon, и Х. Моррис, Солитоны и нелинейные волновые уравнения, пер. с англ., М.: Мир, (1988) 694 стр.
63. Дж.Б. Уизем, Линейные и нелинейные волны, пер. с англ., Москва: Мир (1977) 622 стр.
64. B. Fornberg and G.B. Whitham, , Philos. Trans. R. Soc. London **A 289** (1978) 373.
65. Y. Ishimori, Solitons in a one-dimensional Lennard–Jones lattice, Progr. Theor. Phys. **68** (1982) 402–410.
66. M. Remoissenet and N. Flytzanis, , J.Phys. C **18** (1985) 1573.
67. Yu.B. Gaididei, N. Flytzanis, A. Neuper and F.G. Mertens, Effect of Nonlocal Interactions on Soliton Dynamics in Anharmonic Lattices, Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 2240–2243.
68. O.M. Braun, Yu.S. Kivshar and I.I Zelinskaya, Kinks in the Frenkel–Kontorova model with long-range interparticle interactions, Phys. Rev. B **41** (1990) 7118.

69. L. Vázquez, W.A.B. Evans and G. Rickayzen, Numerical investigation of a non-local sine–Gordon model, *Phys. Lett. A* **189** (1994) 454–459.
70. A.M. Dikandé and T.C. Kofané, Nonlinear dynamics, soft-mode and central-peak phenomena in one-dimensional systems with long-range interparticle interactions, *Physica D* **83** (1995) 450–460.
71. P. Woafó, J.R. Kenne and T.C. Kofané, Toplogical solitons in a sine-Gordon system with Kac-Baker long-range interactions, *J.Phys. Cond. Mat.* **5** (1993) L123–L128.
72. G.L. Alfimov, V.M Eleonsky, N.E. Kulagin and N.V. Mitskevich, Dynamics of topological solitons in models with nonlocal interactions, *Chaos* **3** (1993) 405–414.
73. G.L. Alfimov, V.M Eleonskiĭ and N.V. Mitskevich, Effect of spatial dispersion on self-localized states of a field, *JETP*, **76** (1993) 563–567.
74. J.J. Rasmussen, K. Rypdal, Blow-up in nonlinear Schrödinger equation-I, A general review, *Phys. Scr.* **33** (1986) 481.
75. F.V. Kusmartsev, Application of Catastrophe theory to molecules and solitons, *Phys. Rep.* **183(1)** (1989) 1–35.
76. F. Cooper, H. Shepard, C. Lucheroni and P. Sodano, Post–Gaussian variational method for the nonlinear Schrödinger equation: soliton behavior and blowup, *Physica D* **68** (1993) 344–350.
77. N.E. Kosmatov, V.F. Shvets and V.E. Zakharov, Computer simulations of wave collapses in the nonlinear Schrödinger equation, *Physica D* **52** (1991) 16.

78. Н.Г. Вахитов, А.А. Колоколов, Стационарные решения волнового уравнения в среде с насыщением нелинейности, Изв. ВУЗов: Радиофизика **16** (1973) 1020–1028.
79. G. A. Baker Jr., One-Dimensional Order-Disorder Model Which Approaches a Second-Order Phase Transition, Phys. Rev. **122** (1961) 1477–1484.
80. M. Kac and E. Helfand, Study of Several Lattice Systems with Long-Range Forces, J. Math. Phys. **4** (1963) 1078–1088.
81. R. Camassa and D.D. Holm, An Integrable Shallow Water Equation with Peaked Solitons, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 1661–1664.
82. H.H. Kuehl and C.Y. Zhang, Effects of higher-order dispersion on envelope solitons, Phys. Fluids B **2** (1990) 889–900.
83. P.K.A. Wai, C.R. Menyuk, Y.C. Lee, and H.H. Chen, Nonlinear pulse propagation in the neighborhood of the zero-dispersion wavelength of monomode optical fibers, Opt. Lett. **11** (1986) 464–466.
84. V.I. Karpman, Radiation by solitons due to higher-order dispersion, Phys. Rev. E, **47** (1993) 2073–2082.
85. V.I. Karpman, Envelope solitons in gyrotropic media, Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 2455.
86. W.P. Su, J.R. Schrieffer and A.J. Heeger, Soliton excitations in polyacetylene, Phys. Rev. B **22** (1980) 2099–2111.
87. A.R. Bishop, D.K. Campbell, P.S. Lomdahl, B. Horovitz and S.R. Phillpot, breathers and Photoinduced Absorption in Polyacetylene, Phys. Rev. Lett. **52** (1984) 671–674.

88. M.J. Ablowitz and J.F. Ladik, A nonlinear difference scheme and inverse scattering, *Stud. Appl. Math.* **55** (1976) 213–229.
89. A.C. Scott and L. MacNeil, Binding Energy versus Nonlinearity for a “Small” Stationary Soliton, *Phys. Lett. A* **98** (1983) 87–88.
90. D.N. Christodoulides and R. I. Joseph, Discrete self-focusing in nonlinear arrays of coupled waveguides, *Opt. Lett.* **13** (1988) 794–796.
91. A.J. Sievers and S. Takeno, Intrinsic Localized Modes in Anharmonic Crystals, *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 970–973.
92. V.M. Burlakov, S.A. Kiselev, and V.N. Pyrkov, Computer simulation of intrinsic localized modes in one-dimensional and two-dimensional anharmonic lattices, *Phys. Rev. B* **42** (1990) 4921–4936.
93. R. Bourbonnais and R. Maynard, Energy transport in One- and Two-Dimensional Anharmonic Lattices with Isotopic Disorder, *Phys. Rev. Lett.* **64** (1990) 1397–1400.
94. S. R. Bickham, Intrinsic localized modes in a monoatomic lattice with weakly anharmonic nearest-neighbor force constants, *Phys. Rev. B* **43** (1991) 2339–2354.
95. J. C. Eilbeck and R. Flesch, Calculation of families of solitary waves on discrete lattices, *Phys. Lett. A* **149** (1990) 200–208.
96. T. Dauxois, M. Peyrard and A.R. Bishop, Dynamics and thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation, *Phys. Rev. E* **47** (1993) 684–695.
97. R.S. MacKay and S. Aubry, Proof of existence of breathers for

- time-reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators, *Nonlinearity* **7** (1994) 1623–1643.
98. S. Takeno, Exact anharmonic localized-mode solutions to the d-Dimensional discrete nonlinear Schroedinger equation, *J. Phys. Soc. Jpn.* **58** (1989) 759–762.
99. D. Cai, A.R. Bishop and N. Grønbech-Jensen, Localized States in Discrete Nonlinear Schrödinger Equations, *Phys. Rev. Lett.* **72** (1994) 591–595.
100. M. Salerno, Quantum deformations of the discrete nonlinear Schrödinger equation, *Phys. Rev. A* **46** (1992) 6856–6859.
101. D. Hennig, N.G. Sun, H. Gabriel, and G.P. Tsironis, Spatial properties of integrable and nonintegrable discrete nonlinear Schrödinger equations, *Phys. Rev. E* **52** (1995) 255.
102. O. Bang, J.J. Rasmussen, and P.L. Christiansen, Subcritical localization in the discrete nonlinear Schrödinger equation with arbitrary power nonlinearity, *Nonlinearity* **7** (1994) 205–218.
103. E.W. Laedke, K.H. Spatschek, and S.K. Turitsyn, Stability of Discrete Solitons and Quasicollapse to Intrinsically Localized Modes, *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994) 1055–1059.
104. П. Флори, Статистическая механика цепных молекул, Пер. с англ., Москва: Мир (1971) 440 стр.
105. П. де Жен, Идеи скейлинга в физике полимеров, Пер. с англ., Москва: Мир (1982) 368 стр.
106. Е. Федер, Фракталы, пер. с англ., Москва: Мир (1991) 260 стр.

107. S. Alexander, C. Laermans, R. Orbach, and H.M. Rosenberg, Fracton interpretation of vibrational properties of cross-linked polymers, glasses, and irradiated quartz, *Phys. Rev. B* **28** (1993) 4615–4619.
108. H.J. Stapleton, J.P. Allen, C.P. Flynn, D.G. Stinson, and S.R. Kurtz, Fractal Form of Proteins, *Phys. Rev. Lett.* **45** (1980) 1456–1459.
109. J.S. Helman, A. Coniglio, and C. Tsallis, Fractons and the Fractal Structure of Proteins, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 1195; **54** (1985) 1735.
110. И.С. Градштейн и И. М. Рыжик, Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, изд. 4-е, Москва: ГИФМЛ (1963) 1100 стр.
111. R. Blaha, E.W. Laedke, and K.H. Spatschek, Collapsing states of generalized Korteweg-de Vries equations, *Physica D* **40** (1989) 249–264.
112. E.W. Laedke, R. Blaha, K.H. Spatschek, and E.A. Kuznetsov, On the stability of collapse in the critical case, *J.Math. Phys.* **33** (1992) 967–973.
113. W. Magnus, F. Oberhettinger and R.P. Soni, *Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics*, Berlin-Heidelberg-New York: Springer-Verlag (1966).
114. Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, Статистическая физика, Москва: Наука (1964) 567 стр.
115. T.B. Benjamin and I.F. Feir, The disintegration of wave trains on deep water, *J. Fluid Mech.* **27** (1967) 417–430.
116. M.L. Glasser, V.G. Papageorgiou, and T.C. Bountis, , *SIAM J.Appl. Math.* **49** (1989) 692.
117. Справочник по специальным функциям, под ред. М. Абрамовича и И. Стигана, пер. с англ., Москва: Наука (1979) 830 стр.

118. А.А. Вахненко и Ю.Б. Гайдидей, О характере движения солитонов в дискретных молекулярных цепях, ТМФ **68** (1986) 350–359.
119. D.Cai, A.R. Bishop, and N.Grønbech-Jensen, Perturbation series of a discrete integrable nonlinear Schrödinger model, Phys. Rev. E **53** (1996) 4131–4136.
120. K. Hayata and M. Koshiba, Algebraic solitary-wave solutions of a nonlinear Schrödinger equation, Phys. Rev. E **51** (1995) 1499.
121. K. Hayata and M. Koshiba, Algebraic solitary-wave polaritons in far-infrared transients, Phys. Rev. E **51** (1995) 5155 (BR).
122. D.E. Pelinovsky, V.V. Afanasjev and Yu.S. Kivchar, , Phys. Rev. E **53** (1996) 1940.