

532.59+533.95

СОЛИТОНЫ В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУРАХ**А. С. Давыдов**

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	603
2. Солитоны и экситоны в молекулярных цепях	605
а) Основные уравнения, описывающие взаимодействие внутримолекулярных возбуждений с акустическими фононами (605). б) Возбужденные состояния типа экситонов (609). в) Возбужденные состояния типа солитонов (612).	
3. Солитоны в биологических молекулах	614
а) Альфа-спиральная структура белков (615). б) Солитоны в альфа-спиральных белках (616). в) Численные расчеты солитонных возбуждений в дискретных белковых молекулах (621).	
4. Солитоны и молекулярный механизм мышечного сокращения	623
а) Строение поперечнополосатых мышц (623). б) Современные модели, объясняющие механизм мышечного сокращения (624). в) Новая гипотеза о механизме мышечного сокращения (625).	
5. Динамические свойства солитонов	626
а) Свободные солитоны при малых скоростях движения (627). б) Движение солитонов при наличии сил трения (628). в) Движение солитонов под действием внешних неоднородных полей (630). г) Движение солитонов в молекулярных цепях при наличии теплового движения (631).	
6. Возбуждение солитонов в одномерной молекулярной системе	636
а) Метод обратной задачи рассеяния (636). б) Начальный импульс задан в виде гиперболического секанса (638). в) Начальный импульс задан в виде прямоугольной ступеньки (639).	
Цитированная литература	641

1. ВВЕДЕНИЕ

Слово *солитон* в качестве краткого обозначения *уединенных волн* (solitary waves), соответствующих частным решениям некоторых нелинейных уравнений и описывающих распространение возбуждений в непрерывных средах, обладающих дисперсией и нелинейностью, введено в научную литературу Забуски и Крускалом в 1965 г. ¹ Однако впервые качественное научное описание уединенных волн на поверхности воды в неглубоком канале было дано английским морским инженером Джоном Скоттом-Расселом более 140 лет тому назад.

В Трудах Королевского общества Эдинбурга Скотт-Рассел писал ², что он наблюдал большую одиночную волну, отделившуюся от носа внезапно остановившейся баржи, которую тянула вдоль канала пара лошадей. Приняв форму высокого, одиночного, гладкого, округленного, резко очерченного скопления воды (высота около полуметра, длина ~10 м), одиночная волна быстро покатила вдоль канала. «Я поскакал за ней на лошади,— писал Скотт-Рассел,— и когда нагнал ее, она все еще катила вперед без заметного уменьшения скорости, сохраняя свою

первоначальную форму... Таким в августе 1834 г. оказалась моя первая встреча со столь своеобразным и прекрасным явлением».

На поверхности тяжелой неглубокой жидкости уединенные волны представляют собой распространяющиеся вдоль канала обособленные возвышения уровня жидкости. Если глубина канала мала, то уравнение для средней скорости жидкости (u) в данном сечении сводится к уравнению одномерного движения

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial z} + \beta \frac{\partial^3 u}{\partial z^3} = 0, \quad (1.1)$$

где β — параметр, характеризующий дисперсию. В случае воды в канале глубины h он определяется значением ускорения силы тяжести g с помощью равенства $\beta = \sqrt{gh^3}/6$.

Это уравнение было выведено в 1895 г. Кортевегом и де Вризом³ и теперь называется по имени его авторов *уравнением Кортевега — де Вриза*, сокращенно — уравнение КдВ.

Уже на основании первых наблюдений уединенных волн Скотт-Рассел отметил их исключительную стабильность и автоматическую самоорганизацию. Именно большая стабильность солитонов стимулирует в последние десятилетия многочисленные попытки их использования для объяснения многих новых явлений в различных областях физики и других наук.

Образование солитонов в непрерывной среде, описываемой нелинейными уравнениями, связано со спонтанным нарушением локальной симметрии однородной системы, т. е. с автолокализацией энергии возбуждения, плотности электрического заряда или других физических величин.

Значительно усилился интерес к солитонам в последние десятилетия в связи с исследованиями по физике плазмы. В 1958 г. Сагдеев^{4, 5} показал, что в плазме, находящейся в сильном магнитном поле, могут распространяться солитоны, аналогичные солитонам на поверхности воды. В обзоре Кадомцева и Карпмана⁶ дано подробное описание применения уравнения КдВ для описания магнитно-звуковых и ионно-звуковых солитонов в плазме. В том же обзоре (§ 4.2) упоминается *нелинейное уравнение Шредингера* (НШ). В простейшем одномерном случае оно имеет вид

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + G |\psi|^2 \right) \psi = 0, \quad (1.2)$$

где G — параметр нелинейности, $\hbar^2/2m^*$ — параметр, характеризующий дисперсию.

Уравнение НШ используется для описания явлений самофокусировки в нелинейной оптике, одномерной автомодуляции монохроматической волны в плазме, стационарной двухмерной самофокусировки плоской волны и др.

Некоторые задачи теории сверхпроводимости и ферромагнетизма сводятся к *уравнению синус-Гордона*:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \sin \psi. \quad (1.3)$$

Простейшие решения этого уравнения в пространстве одного измерения являются типичными примерами так называемых *топологических солитонов*, для которых граничные условия на бесконечности не совпадают: например, в одномерной системе $\psi(\infty) \neq \psi(-\infty)$. Решения одномерных уравнений КдВ и НШ, удовлетворяющие граничным условиям $\psi(\infty) = \psi(-\infty) = 0$, называются *нетопологическими* или *динамическими солитонами*.

Кроме упомянутых выше уравнений известно несколько других нелинейных уравнений, содержащих дисперсию, решения которых вследствие взаимного уравновешивания эффектов нелинейности и дисперсии имеют частные решения в виде устойчивых уединенных волн — *солитонов*.

Наиболее подробно изучены решения уравнений (1.1) — (1.3) для одномерных систем. В одномерном случае эти уравнения обладают замечательным математическим свойством. Они интегрируются с помощью так называемого *метода обратной задачи рассеяния* для вспомогательного линейного оператора. Метод обратной задачи ведет свое начало с работы Гарднера, Грина, Крускала и Миуры⁷. В дальнейшее развитие этого метода значительный вклад внесли работы Захарова, Фаддеева, Новикова, Колоджеро, Марченко и др.⁸⁻¹². Систематическому изложению метода обратной задачи рассеяния посвящена монография Захарова, Манакова, Новикова и Питаевского¹³.

В обстоятельном обзоре Скотта, Джу и Мак-Лафлина¹⁴ рассмотрены применения понятия солитонов к различным областям прикладных наук. В настоящем обзоре излагаются результаты теоретических исследований солитонов, возникающих в квазиодномерных молекулярных структурах. В частности, такие структуры реализуются в альфа-спиральных белковых молекулах живых организмов. В связи с биологическими приложениями в обзоре рассматриваются только случаи, когда в системе одновременно возбуждается лишь один солитон. В качестве объекта исследования рассматриваются молекулярные цепи, в которых периодически повторяющиеся молекулы (группы атомов) соединены слабыми водородными связями. Такие молекулярные цепи в некотором приближении моделируют альфа-спиральные белковые молекулы.

Исследованиями, проведенными в Институте теоретической физики АН УССР, показано, что с помощью солитонов вдоль белковых молекул могут переноситься без потери энергии вибрационные внутримолекулярные возбуждения и электроны. Этими работами открывается новая область приложения понятия солитона.

2. СОЛИТОНЫ И ЭКСИТОНЫ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЦЕПЯХ *)

а) Основные уравнения, описывающие взаимодействие внутримолекулярных возбуждений с акустическими фононами

Первые исследования взаимодействий внутримолекулярных возбуждений с акустическими фононами в одномерных системах проведены в работах Рашбы^{15, 16}. В этих работах, как и в ряде последующих (Тоязава, Давыдов и др.¹⁷⁻²⁰), рассматривались условия образования связанных состояний внутримолекулярного возбуждения и деформации цепи без учета движения возбуждения.

При исследовании движения возникают две основные трудности, связанные с выделением центра инерции возбуждения, перемещающегося вместе с деформацией, и с правильным учетом запаздывания деформации при переносе возбуждения. Наиболее строго и последовательно эти трудности преодолены в работах Боголюбова²¹ и Тябликова²². В этих работах, относящихся к аналогичной задаче о движении электрона, была развита адиабатическая теория возмущений, в которой кинетическая энергия фононного поля рассматривалась как малое возмущение. Поэто-

*) Эта глава написана на основании исследований, проведенных Еремко, Кислухой, Сергиенко и автором²⁵⁻²⁸.

му ее удобно применять только при исследовании возбуждений, перемещающихся с малыми (по сравнению со скоростью звука) скоростями в сравнительно жестких системах с параметрами твердых тел. В этих работах была правильно решена проблема выделения центра массы возбуждения. Однако это было достигнуто путем введения трех лишних переменных и трех дополнительных условий для сохранения правильного числа степеней свободы. Это обстоятельство в значительной степени усложнило теорию и не позволило проводить вычисления далее учета членов первого порядка. Метод адиабатической теории возмущений использовался и в более поздних работах Мельникова, Воловика и Эдельштейна^{23, 24}.

Ниже излагаются результаты исследования коллективных (не переносящих электрического заряда) возбуждений в одномерных «мягких» молекулярных цепях без использования адиабатической теории возмущений. Кинетическая энергия фононного поля учитывается точно. Выделение центра инерции осуществляется простым (широко используемым в теории бегущих волн) переходом в систему координат, движущуюся вместе с возбуждением. Показано, что такие возбуждения описываются нелинейными дифференциальными уравнениями, учитывающими эффект временного запаздывания.

Для получения основных уравнений, характеризующих возбуждения в цепочке слабо связанных молекул, предположим, что вдоль оси z в узлах na ($n = 0, \pm 1, \dots$) расположены молекулы массы M . Каждая молекула может переходить в возбужденное состояние с энергией \mathcal{E}_0 , включающей энергию нерезонансного взаимодействия с соседними молекулами. Электрический дипольный момент перехода \mathbf{d} в возбужденное состояние направлен либо вдоль, либо перпендикулярно оси z . Если B_n^+ и B_n — операторы рождения и уничтожения возбуждения, а u_n — оператор продольного смещения равновесного положения молекулы n , то оператор Гамильтона бесконечной цепочки молекул можно записать в виде суммы трех слагаемых

$$H = H_{\text{ex}} + H_{\text{ph}} + H_{\text{int}}, \quad (2.1)$$

где

$$H_{\text{ex}} = \sum_n B_n^+ [\mathcal{E}_0 B_n - J (B_{n+1} + B_{n-1})], \quad (2.2)$$

$$H_{\text{ph}} = \frac{1}{2} \sum_n \left[\frac{1}{M} \hat{p}_n^2 + \kappa (u_n - u_{n-1})^2 \right], \quad (2.3)$$

$$H_{\text{int}} = \chi \sum_n B_n^+ B_n (u_{n+1} - u_{n-1}). \quad (2.4)$$

В этих выражениях параметр κ характеризует продольную упругость цепочки, \hat{p}_n — оператор импульса, канонически сопряженный u_n ; χ — параметр связи внутримолекулярных возбуждений со смещениями молекул u_n .

H_{ex} — оператор внутримолекулярных возбуждений при закрепленных в узлах na молекулах. Энергия резонансного диполь-дипольного взаимодействия ($-J$) между соседними молекулами выражается через дипольный момент перехода \mathbf{d} равенствами

$$J = \begin{cases} 2\mathbf{d}^2/a^3, & \text{если } \mathbf{d} \text{ параллелен оси } z, \\ -\mathbf{d}^2/a^3, & \text{если } \mathbf{d} \text{ перпендикулярен оси } z. \end{cases} \quad (2.5)$$

При сильной связи внутримолекулярных возбуждений со смещениями молекул все три слагаемые в (2.1) следует рассматривать на равных

основаниях. Волновую функцию коллективных возбуждений цепочки, описываемой гамильтонианом (2.1), можно искать в виде

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n A_n(t) B_n^\dagger \exp \sigma(t) |0\rangle, \quad (2.6)$$

где $|0\rangle$ — функция вакуумного состояния,

$$\sigma(t) \equiv -\frac{i}{\hbar} \sum_n [\beta_n(t) \hat{p}_n - \pi_n(t) u_n]. \quad (2.7)$$

Условие нормировки функции (2.6) приводит к равенству

$$\sum_n |A_n|^2 = 1. \quad (2.8)$$

Следовательно, $|A_n|^2$ характеризует вероятность возбуждения молекулы номера n в цепочке.

Переход от операторов смещений u_n и сопряженных к ним операторам импульсов \hat{p}_n к функциям $\beta_n(t)$ и $\pi_n(t)$ с помощью унитарного оператора смещений $\exp \sigma(t)$, входящего в выражение (2.6), соответствует описанию смещений равновесных положений молекул на языке когерентных состояний. Как известно^{29, 30}, временная эволюция когерентных состояний происходит в соответствии с классическими уравнениями движения (см. ниже уравнения (2.12) и (2.12а)). Однако это не означает, что величинам $\beta_n(t)$ и $\pi_n(t)$ можно придать строго классическую интерпретацию. Они характеризуют средние смещения равновесных положений и импульсов в состоянии (2.6):

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

Когерентным состояниям соответствуют волновые пакеты как в координатном, так и в импульсном пространствах, соответствующие состояниям, в которых произведение квадратичных отклонений от средних определяется минимальным значением $\hbar^2/4$, допустимым квантовой механикой.

Используя явный вид выражений (2.1) — (2.7), находим

$$H \equiv \langle \psi(t) | H | \psi(t) \rangle = \sum_n A_n^* [(\mathcal{E}_0 + W) A_n - J(A_{n+1} + A_{n-1}) + \chi A_n (\beta_{n+1} - \beta_{n-1})], \quad (2.9)$$

где

$$W \equiv \frac{1}{2} \sum_n \left[\frac{1}{M} \pi_n^2 + \kappa (\beta_n - \beta_{n-1})^2 \right] \quad (2.10)$$

— полная энергия деформации цепи. Рассматривая выражение (2.9) как гамильтонову функцию переменных A_n и β_n и канонически сопряженных им обобщенных импульсов, находим гамильтоновы уравнения

$$i\hbar \frac{\partial A_n}{\partial t} = [\mathcal{E}_0 + W + \chi(\beta_{n+1} - \beta_{n-1})] A_n - J(A_{n+1} + A_{n-1}), \quad (2.11)$$

$$M \frac{\partial^2 \beta_n}{\partial t^2} + \kappa (2\beta_n - \beta_{n+1} - \beta_{n-1}) = \chi (|A_{n+1}|^2 - |A_{n-1}|^2), \quad (2.12)$$

$$\pi_n = M \frac{\partial \beta_n}{\partial t}. \quad (1.12a)$$

При переходе к континуальному приближению проведем преобразование

$$\begin{aligned} A_n(t) &\rightarrow \Phi(z, t) \exp \left[i \left(kz - \frac{Et}{\hbar} \right) \right], \\ \beta_n(t) &\rightarrow \beta(z, t), \end{aligned} \quad (2.13)$$

в котором $\Phi(z, t)$ и $\beta(z, t)$ — вещественные плавные функции переменной z , принимающие соответственно значения $\Phi_n(t)$ и $\beta_n(t)$ при $z = na$. Согласно (2.8) и (2.13) функция $\Phi(z, t)$ должна удовлетворять условию нормировки *)

$$\frac{1}{a} \int \Phi^2(z, t) dz = 1. \quad (2.14)$$

В соответствии с (2.13) при переходе к континуальному приближению надо использовать равенства

$$A_{n\pm 1}(t) \rightarrow \exp \left\{ i \left[k(z \pm a) - \frac{Et}{\hbar} \right] \right\} \times \\ \times \left(1 \pm a \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{2} a^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \dots \right) \Phi(z, t), \quad (2.15)$$

$$\beta_{n\pm 1}(t) \rightarrow \left(1 \pm a \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{2} a^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \dots \right) \beta(z, t).$$

Проведя преобразования (2.13) и (2.15) в выражениях (2.10) — (2.12), получим систему уравнений для вещественных функций

$$\hbar \frac{\partial \Phi(z, t)}{\partial t} = -2aJ \frac{\partial \Phi}{\partial z} \sin ka, \quad (2.16)$$

$$\left[\Lambda + a^2 \tilde{J} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2\chi\rho(z, t) \right] \Phi(z, t) = 0, \quad (2.16a)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - V_0^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \rho(z, t) = -\frac{2\chi V_0^2}{\kappa} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Phi^2(z, t), \quad (2.16b)$$

где

$$\tilde{J} = J \cos ka \quad (2.17)$$

— перенормированная энергия резонансного взаимодействия;

$$V_0 = a \sqrt{\frac{\kappa}{M}} \quad (2.18)$$

— скорость продольного звука в невозбужденной цепи;

$$\rho(z, t) = -a \frac{\partial}{\partial z} \beta(z, t) \quad (2.19)$$

— функция, характеризующая уменьшение расстояний между соседними молекулами [$a \rightarrow a - \rho(z, t)$];

$$E = \Lambda + \mathcal{E}_0 + W - 2\tilde{J} \quad (2.20)$$

— полная энергия солитона;

$$W = \frac{1}{2a} \int \left[M \left(\frac{\partial \beta}{\partial t} \right)^2 + \kappa \rho^2 \right] dz \quad (2.21)$$

— кинетическая и потенциальная энергии, обусловленные смещениями равновесных положений молекул.

Уравнения (2.16) — (2.16b) определяют энергию E и функции $\Phi(z, t)$ и $\rho(z, t)$ состояний цепочки, соответствующие одному внутримолекулярному возбуждению с энергией \mathcal{E}_0 .

Вследствие трансляционной инвариантности оператора (2.1) стационарные решения системы уравнений (2.16) — (2.16b) можно искать в виде возбуждений, распространяющихся с постоянной скоростью V . Для

*) Здесь и в последующих выражениях этого обзора (если это не оговорено особо) интегрирование выполняется в бесконечных пределах.

этого достаточно положить

$$\rho(z, t) = \rho(\xi), \quad \Phi(z, t) = \Phi(\xi),$$

где

$$\xi \equiv z - z_0 - Vt. \quad (2.22)$$

Для таких возмущений

$$\frac{\partial \Phi(z, t)}{\partial t} = -\frac{V d\Phi(\xi)}{d\xi}, \quad \frac{\partial \rho(z, t)}{\partial t} = -\frac{V d\rho(\xi)}{d\xi}, \quad \frac{\partial \Phi(z, t)}{\partial z} = \frac{d\Phi(\xi)}{d\xi}, \dots \quad (2.23)$$

поэтому уравнения (2.16) в частных производных становятся обыкновенными дифференциальными уравнениями

$$(\hbar V - 2aJ \sin ka) \frac{d\Phi}{d\xi} = 0, \quad (2.24)$$

$$\left[\Lambda + a^2 \tilde{J} \frac{d^2}{d\xi^2} + 2\chi\rho(\xi) \right] \Phi(\xi) = 0, \quad (2.25)$$

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \left[(1 - s^2) \rho(\xi) - \frac{2\chi}{a\kappa} \Phi^2(\xi) \right] = 0, \quad (2.26)$$

где

$$s = \frac{V}{V_0}. \quad (2.27)$$

Из уравнения (2.26) следует, что вызванные внутримолекулярными возмущениями уменьшения равновесных расстояний между молекулами в системе координат, движущейся вместе с возмущением, определяются функцией

$$\rho(\xi) = \frac{2\chi\Phi^2(\xi)}{\kappa(1-s^2)}. \quad (2.28)$$

Подставив это значение в уравнение (2.25), мы преобразуем его в нелинейное уравнение Шрёдингера для стационарных состояний, перемещающихся с постоянной скоростью $V = sV_0$ вдоль цепочки:

$$\left[\Lambda + a^2 \tilde{J} \frac{d^2}{d\xi^2} + G\Phi^2(\xi) \right] \Phi(\xi) = 0, \quad (2.29)$$

где параметр нелинейности

$$G = \frac{4\chi^2}{a\kappa(1-s^2)} \quad (2.30)$$

учитывает временное запаздывание деформационных смещений. При $V_0 = \infty$ смещения безынерционно следуют за перемещением возмущения и G не зависит от V .

При $s^2 \rightarrow 1$ параметр нелинейности (2.30) и уменьшение расстояний (2.28) между молекулами резко возрастают. При больших смещениях молекул использованное в (2.3) гармоническое приближение неприменимо. Развитая теория справедлива только при $s^2 \ll 1$. Для расширения области применимости теории необходимо учесть более быстрое, чем квадратичное, возрастание потенциальной энергии взаимодействия между молекулами.

б) Возбужденные состояния типа экситонов

Если скорость возбуждения превышает скорость продольного звука ($s^2 > 1$), то параметр нелинейности уравнения (2.29) отрицателен. В этом случае уравнение в цепи бесконечных размеров не имеет стационарных решений, нормированных условием (2.14). В цепочке достаточно большой

длины L (когда можно не учитывать влияние концов) нормированные стационарные решения уравнения (2.29) соответствуют $\Phi(\zeta) = L^{-1/2}$. В этом случае уравнение (2.24) удовлетворяется при любом значении волнового числа k , характеризующего волновую функцию в виде плоской волны

$$A_k(z, t) = \sqrt{\frac{a}{L}} \exp \left\{ i \left[kz - \frac{E(k)t}{\hbar} \right] \right\}. \quad (2.31)$$

При этом, согласно (2.29), энергия возбуждения

$$E(k) = \mathcal{E}_0 - \frac{aG}{L} - 2J \cos ka, \quad G < 0. \quad (2.32)$$

В достаточно длинных цепочках ($L \gg a$) можно опустить второе слагаемое в (2.32).

Состояния, описываемые плоскими волнами (2.31), называются *экситонами*. В этих состояниях все молекулы возбуждены с равной вероятностью. При этом, согласно (2.28), изменение межмолекулярных расстояний определяется выражением

$$\Delta a = -\rho(\zeta) = \frac{2a\chi}{\kappa L(s^2 - 1)}. \quad (2.33)$$

В длинных цепочках это изменение очень мало. Однако общая длина цепочки L , содержащая L/a молекул, изменяется на конечную величину

$$\Delta L = \frac{2\chi}{\kappa(s^2 - 1)}. \quad (2.33a)$$

Условие $\Delta L \ll L$ накладывает ограничение на допустимые значения s^2 .

При $J > 0$ (см. (2.5)) минимум энергии (2.32) экситонов

$$E(0) = \mathcal{E}_0 - 2J - \frac{aG}{L} \quad (L \gg a), \quad (2.34)$$

соответствует $k = 0$. Значение $E(0)$ называют энергией дна экситонной зоны. Все энергетические состояния зоны энергий экситонов определяются волновыми числами, удовлетворяющими неравенству $|ka| \leq \pi$. Вблизи дна экситонной зоны, при выполнении неравенства $|ka| \ll 1$, выражение (2.34) можно преобразовать к виду

$$E(V) = E(0) + \frac{1}{2} m_{\text{ex}} V^2, \quad (2.35)$$

где

$$V = \frac{\hbar k}{m_{\text{ex}}}, \quad m_{\text{ex}} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J} \quad (2.35a)$$

— эффективная масса экситона. Для выполнения условия $s^2 > 1$ необходимо, чтобы $J > \hbar V_0/2a$.

При $J < 0$ в области значений $|ka| \ll 1$ формулы (2.35) сохраняют свой смысл. При этом эффективная масса экситона отрицательна. Значение $k = 0$ соответствует максимальной энергии солитона (потолок зоны). Энергия дна экситонной зоны соответствует $|k| = \pi/a$. В области дна экситонной зоны и в этом случае энергия выражается формулой (2.33) с положительной эффективной массой экситона $m_{\text{ex}} = \hbar^2/2a^2 |J|$ и значениями

$$V = \frac{[k - (\pi/a)] \hbar}{m_{\text{ex}}}, \quad |ak - \pi| \ll 1.$$

Рассмотренные выше энергии (2.32) стационарных состояний экситонов являются собственными значениями полного оператора энергии (2.1)

без учета энергии колебаний молекул. При переходе в такие возбужденные состояния длина цепочки изменяется на величину, определяемую формулой (2.33а). Она увеличивается при $s^2 > 1$ и уменьшается при $s^2 < 1$.

Экситонные состояния в цепочке возбуждаются светом частоты ω (без участия фононов) при выполнении законов сохранения энергии и квазиимпульса, если проекция напряженности электрического поля на вектор перехода \mathbf{d} не равна нулю. Для инфракрасного, видимого и ультрафиолетового света $a\omega \ll c$, поэтому возбуждаются экситоны с малыми ka . При этом, однако, надо иметь в виду, что в момент перехода цепочки в возбужденное состояние под действием света молекулы не успевают сместиться в новые равновесные положения (принцип Франка — Кондона). Поэтому, строго говоря, переходы осуществляются не в состояния, соответствующие полному гамильтониану (2.1), а в состояния, определяемые только оператором (2.2), в котором расстояния между молекулами сохраняются равными a . Собственные функции оператора (2.2) также являются плоскими волнами (2.31), соответствующими определенному значению k (экситоны). Их энергии определяются выражением

$$E(k) = \mathcal{E}_0 - 2J \cos ka,$$

которое при выполнении неравенства $a \ll L$ практически совпадает с (2.32). Однако эти экситоны не являются стационарными. Взаимодействие, определяемое оператором (2.4), приводит при участии фононов к переходам между состояниями с разными k . В частности, при $s > 1$, вследствие эффекта Черенкова экситоны будут тормозиться (при низких температурах), испуская звуковые фононы. Эти эффекты обычно учитывают методами теории возмущений.

Экситонные состояния с определенными значениями k распределены равномерно по всей длине цепочки. Возбуждения, охватывающие небольшую часть цепочки l_0 , не являются стационарными. Они описываются суперпозицией плоских волн — *волновым пакетом*:

$$\Psi(z, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} C(k) A_k(z, t) dk, \quad \Delta k = \frac{\pi}{2l_0}, \quad (2.36)$$

составленным из плоских волн (2.31) с различными значениями k . Такое возбуждение распространяется вдоль цепочки с групповой скоростью

$$v = \frac{\hbar k_0}{m_{ex}} = \frac{2k_0 a^2 |J|}{\hbar}, \quad (2.37)$$

где $\hbar k_0$ — средний импульс экситона в квазистационарном состоянии (2.36). Однако с течением времени область, охваченная возбуждением, расширяется. Если в момент времени t она равнялась l_0 , то к моменту времени $t + \tau$ она будет равна

$$l_\tau = \sqrt{l_0^2 + \frac{\hbar \tau}{(m_{ex} l_0)^2}}.$$

Расплывание волнового пакета (2.36) является одним из признаков нестройной стационарности описываемых им состояний.

Плоские волны (2.31) при значениях $\Phi(z, t) = \text{const}$ будут решениями уравнения (2.29) и при значениях $s^2 < 1$. Однако в этом случае, как будет показано ниже, наряду с экситонами с энергиями в области экситонной зоны $E(k)$ возможны весьма устойчивые возбуждения — солитоны с энергиями, лежащими под дном экситонной зоны. Поэтому при $s^2 < 1$ экситоны являются метастабильными.

в) Возбужденные состояния типа солитонов

При значениях $s^2 < 1$ параметр нелинейности уравнения (2.29) положителен. Если $J > 0$, то оно имеет нормированное условием (2.14) частное решение вида

$$\Phi(\zeta) = \frac{\sqrt{aQ}}{\sqrt{2} \operatorname{ch} Q\zeta} \quad (2.38)$$

при значениях

$$Q = \frac{G}{4a\tilde{J}} = \frac{\chi^2}{2a^2\kappa J(1-s^2) \cos ka} \quad (2.39)$$

и

$$\Lambda = a^2 Q^2 J \cos ka. \quad (2.40)$$

Значение k выражается через скорость V (см. ниже).

Возбуждение, описываемое амплитудой (2.38) волновой функции (2.13), называется *солитоном*. Оно распределено на отрезке $\Delta\zeta \approx 2\pi/Q$ в системе координат ζ , движущейся вместе с возбуждением со скоростью $V = sV_0$. Условие применимости континуального приближения требует выполнения неравенства

$$aQ \ll 1. \quad (2.41)$$

Согласно (2.39) это неравенство устанавливает в рамках применяемого приближения верхнюю границу допустимых скоростей солитона.

В области возбуждения $d\Phi/d\zeta \neq 0$, поэтому согласно (2.24) должно выполняться равенство

$$\sin ka = \frac{\hbar V}{2a|J|} \equiv \tau, \quad (2.42)$$

которое неявно связывает значение k со скоростью V перемещения возбуждения. Из условия вещественности входящего в (2.17) множителя $\cos ka = \sqrt{1-\tau^2}$ следует неравенство

$$\tau^2 < 1, \quad \text{или} \quad V < \frac{2a|J|}{\hbar} \equiv V_g. \quad (2.43)$$

Скорость V_g в неравенстве (2.43) соответствует максимальной групповой скорости экситона в зоне.

Неравенство (2.43) наряду с неравенствами (2.41) и $s^2 < 1$ ограничивает допустимые скорости перемещения солитона. Из (2.42) и (2.43) следует, что при $J > 0$ значения k могут находиться в интервале $|ak| \ll \ll \pi/2$, а при $J < 0$ — в интервале $|ak - \pi| \ll \pi/2$.

Перейдем к вычислению энергии солитона, перемещающегося с постоянной скоростью V . С помощью (2.19) и (2.23) выражение (2.21), определяющее полную энергию деформации цепи, преобразуется к виду

$$W = M(V^2 + V_0^2)(2a^2)^{-1} \int \rho^2(\zeta) d\zeta. \quad (2.44)$$

Используя значения (2.28) и (2.38), получаем окончательное выражение

$$W = \frac{2\chi^4(1+s^2)}{3\kappa^2(1-s^2)^2 |J| \cos ka}. \quad (2.44a)$$

Полная энергия солитона (2.20), при учете (2.40) и (2.44a), определяется выражением

$$E_{\text{sol}}(V) = \mathcal{E}_0 - 2|J| \sqrt{1-\tau^2} + \frac{(5s^2-1)\chi^4}{3\kappa^2(1-s^2)^3 |J| \sqrt{1-\tau^2}}, \quad (2.45)$$

где

$$s \equiv \frac{V}{V_0}, \quad \tau = \frac{V}{V_g}.$$

Из (2.44а) и (2.45) следует, что при возрастании скорости солитона значительно возрастает энергия деформации цепи и полная энергия солитона. Поэтому конечным значениям $E(V)$ соответствуют скорости солитона V , меньшие наименьшей из скоростей V_0 и V_g .

При малых скоростях солитона, когда $s^2 \ll 1$ и $\tau^2 \ll 1$, полную энергию солитона (2.45) можно преобразовать к виду

$$E_{\text{sol}}(V) = E_{\text{sol}}(0) + \frac{1}{2} m_{\text{sol}} V^2, \quad (2.46)$$

где

$$E_{\text{sol}}(0) = \mathcal{E}_0 - 2|J| - \frac{\chi^4}{3\kappa^2|J|} \quad (2.47)$$

— энергия покоящегося солитона. Она ниже энергии дна энергетической полосы экситонных состояний (2.34а) на величину

$$\Delta E = \frac{\chi^4}{3\kappa^2|J|} = \frac{a^2\chi^4}{3|J|MV_0^2}, \quad (2.48)$$

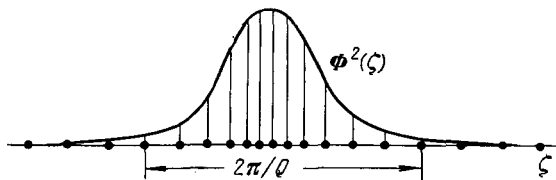
которая велика при большой связи внутримолекулярных возбуждений со смещениями молекул (параметр χ) и малой упругости продольных деформаций (параметр κ).

Эффективная масса солитона определяется выражением

$$m_{\text{sol}} = m_{\text{ex}} \left[1 + \frac{3\chi^4}{3\kappa^2|J|V_0^2} \left(1 - \frac{V_0}{4V_g} \right) \right]. \quad (2.49)$$

В мягких цепочках (при $V_0 < V_g$) масса солитона значительно превышает массу экситона, так как движение солитона сопровождается движением

Рис. 1. Качественное распределение вероятностей внутримолекулярных возбуждений (вертикальные линии) и расстояний между молекулами (точки) в области солитонного возбуждения.



локальной деформации цепи. Вследствие большой массы солитона он может переносить значительную энергию и при малых скоростях движения.

Подставив (2.38) в (2.28), находим функцию

$$\rho(\zeta) = \frac{aQ\chi}{\kappa(1-s^2)\text{ch}^2 Q\zeta}, \quad (2.50)$$

которая при учете значения (2.39) характеризует уменьшение межмолекулярных расстояний в цепочке в области солитонного возбуждения. Качественное распределение вероятностей внутримолекулярных возбуждений и расстояний между молекулами в области солитонного возбуждения указаны на рис. 1. Рис. 2 иллюстрирует зависимость энергии солитонов и экситонов от их скорости.

Наличие энергетической щели (2.48) в спектре возбужденных состояний молекулярной цепочки является одной из причин очень высокой стабильности солитонов. Для разрушения солитона — расщепления его на свободный экситон и однородную деформацию — требуется затратить энергию ΔE .

Поскольку солитоны всегда движутся со скоростью, меньшей скорости продольного звука в цепи, они не излучают фононы. Другими словами, их кинетическая энергия не преобразуется в энергию теплового движения. Это вторая важная особенность, обеспечивающая большую стабильность солитонов в молекулярных цепях.

Колоколообразная форма солитонов (2.38) не зависит от способа их образования. Она является самосогласованной. При $s^2 \ll 1$ форма солитона не меняется даже при уменьшении его кинетической энергии. Напротив, форма волнового пакета (2.36) зависит от начального распределения амплитуд $C(k)$. С течением времени волновой пакет «расплывается».

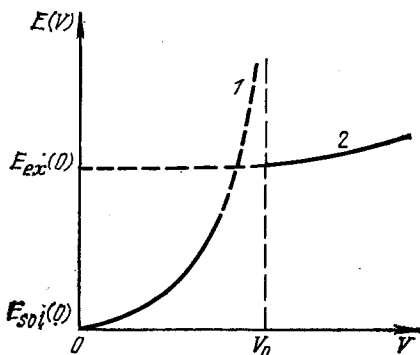


Рис. 2. Качественная зависимость энергии возбуждения от скорости V . 1 — солитоны, 2 — экситоны. V_0 — скорость продольного звука.

При увеличении энергии резонансного взаимодействия (J) и жесткости цепи κ различия в свойствах солитонов и экситонов уменьшаются. Область, охваченная возбуждением $\Delta\xi = 2\pi/Q$, согласно (2.39) при этом возрастает. Эффективная масса солитона приближается к эффективной массе экситона у дна зоны. Внутренняя энергия солитона $E_{sol}(0)$ приближается к энергии дна экситонной зоны $E_{ex}(0)$.

Поглощение света молекулярными системами не сопровождается изменением координат тяжелых частиц в момент квантового перехода (принцип Франка — Кондона). Поскольку образование солитонов сопровождается смещениями равновесных положений молекул, оно не может осуществляться светом. По той же причине весьма мала вероятность излучения света солитоном. Теория этого вопроса развивалась в работе Еремко и автора ²⁶.

Поглощение света молекулярными системами не сопровождается изменением координат тяжелых частиц в момент квантового перехода (принцип Франка — Кондона).

Солитоны, соответствующие положительному значению J , могут возбуждаться локальными внешними воздействиями, например, химическими реакциями. Вероятность возбуждения солитонов наибольшая, когда такое локальное воздействие осуществляется на конце молекулярной цепи. Если дно экситонной зоны соответствует значению $k = \pi/a$ (при $J < 0$), то в солитонном состоянии возбуждения соседних молекул находятся в антифазе. Возбуждение таких солитонов требует весьма специфических и трудно осуществимых условий.

3. СОЛИТОНЫ В БИОЛОГИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛАХ

Известно, что многие биологические явления связаны с пространственным перемещением энергии вдоль белковых молекул. Как теперь установлено, универсальной единицей энергии, переносимой белковыми молекулами, является энергия (около 0,43 эВ), выделяемая при гидролизе молекул аденозинтрифосфата (АТФ). Эта энергия только в 20 раз превышает среднюю тепловую энергию при физиологических температурах. Такой энергии недостаточно для возбуждения электронных состояний. Поэтому в перемещении энергии гидролиза молекул АТФ должны играть основную роль вибрационные возбуждения некоторых групп атомов в белковых молекулах.

Многочисленно высказывалось предположение, что наибольшую роль в переносе энергии в белках играют вибрационные колебания $C=O$

в пептидных группах (см. ниже раздел 3, а). Эти колебания называют Амид I. Они имеют энергию около 0,21 эВ и сравнительно большой электрический дипольный момент перехода $d \approx 0,3$ Дебая, обеспечивающий большое резонансное взаимодействие между пептидными группами, приводящее к коллективизации возбуждения.

Изолированные колебания такого типа в конденсированной среде обладают малым временем жизни — около 10^{12} с. При вероятной скорости 10^4 см/с они могли бы сместиться на расстояние порядка 10^{-8} см. В связи с этим многие исследователи высказывали сомнения в возможности участия этих колебаний в переносе энергии вдоль белковых молекул, имеющих размеры 10^{-5} см. Так, например, в 1973 г. при обсуждении вопроса о переносе энергии в биологических системах на совещании Нью-Йоркской академии наук некоторые участники говорили о «кризисе» в биоэнергетике, о необходимости установления априорным методом особых законов биоэнергетики^{31,32}.

В работах автора³³⁻³⁵ показано, что отмеченная выше трудность снимается, если учесть, что передача энергии гидролиза молекул АТФ вдоль альфа-спиральных молекул осуществляется в виде солитонов, движущихся без потери энергии на излучение фононов. Ниже мы изложим основные результаты этих работ. Но предварительно в разделе а) обобщим некоторые элементарные сведения о структуре белков.

а) А л ь ф а-с п и р а л ь н а я с т р у к т у р а б е л к о в

В стабилизации и увеличении времени жизни вибрационных состояний в белковых молекулах ключевую роль играет специфическая структура этих молекул. Ниже мы приведем только некоторые сведения о структуре белков, необходимые для понимания используемых нами математических моделей. Более полные сведения содержатся в монографиях Волькенштейна³⁶ и автора³⁷.

Белки являются полимерными молекулами с очень большим молекулярным весом. Это самые крупные и наиболее сложные молекулы, входящие в состав клеток живых организмов. Все белки строятся из небольшого числа (около 20) структурных единиц — аминокислотных остатков.

На рис. 3 изображена структура аминокислоты. Полимеризация аминокислот (при наличии соответствующих катализаторов и энергии) сопровождается образованием молекулы воды при отщеплении водорода от аминогруппы NH_2 одной аминокислоты и гидроксила OH от карбоксильной группы COOH другой. При этом азот и углерод аминокислотных остатков соединяются между собой, образуя химическую пептидную связь. Такой процесс полимеризации может продолжаться многократно, образуя длинные полипептидные цепи (белки) с повторяющимися группами

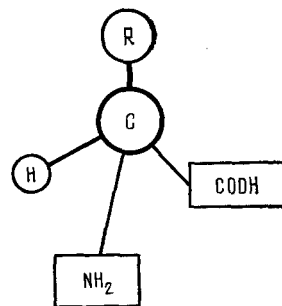


Рис. 3. Структурная схема молекулы аминокислоты.

NH_2 — аминогруппа; COOH — карбоксильная группа; R — группа атомов, которыми одна аминокислота отличается от другой.

четырёх атомов $\text{H}-\text{N}-\text{C}=\text{O}$, называемых пептидными группами. На рис. 4

изображен участок белковой цепи, содержащий две пептидные группы. Последовательность расположения различных остатков аминокислот в молекуле называется первичной структурой белка.

Атомы, входящие в состав каждой пептидной группы, лежат в одной плоскости. Однако вся белковая молекула является весьма гибкой струк-

турой вследствие возможности вращения вокруг одинарных связей. На рис. 4 такие вращения указаны стрелками. Гибкая белковая молекула может образовать различные пространственные конфигурации (вторичная структура белка).

В частности, белковая цепь может свернуться в спираль. Такая спиральная структура белковой молекулы впервые установлена Полингом

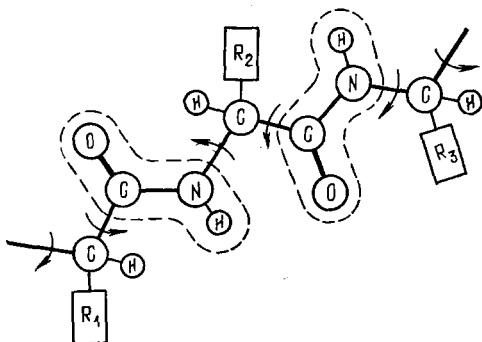


Рис. 4. Участок белковой молекулы, содержащий две пептидные группы (обведены штриховой линией).

и Кори в 1953 г. (см. ³⁸). Они назвали ее альфа-спиралью и показали, что она возникает при образовании трех цепочек водородных связей между пептидными группами белковой молекулы. На рис. 5 пептидные группы изображены эллипсами, а водородные связи — линиями, соединяющими эти группы.

Равновесные положения пептидных групп в молекуле, ось которой совпадает с осью z , можно представить радиусами-векторами

$$R_{n\alpha} = R \left[e_x \cos \frac{2\pi}{p} (3n + \alpha) + e_y \sin \frac{2\pi}{p} (3n + \alpha) \right] + e_z \frac{a}{p} (3n + \alpha), \quad (3.1)$$

где e_x, e_y, e_z — единичные взаимноортогональные векторы, индекс $\alpha = I, II, III$ соответствует трем цепочкам пептидных связей; a — шаг спирали

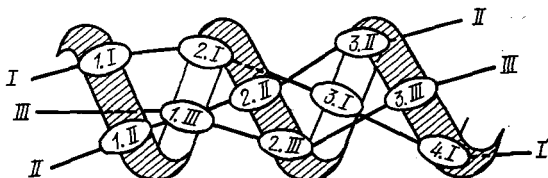


Рис. 5. Три цепочки водородных связей между пептидными группами (изображены эллипсами) в альфа-спиральной белковой молекуле.

(5,4 Å); R — ее радиус (2,8 Å) по центрам пептидных групп; $p = 3,6$ — число пептидных групп, приходящихся на один виток спирали. $n = 0, 1, 2, \dots$ — номера ячеек из трех ближайших пептидных групп с разными индексами α . Одна такая ячейка совпадала бы с элементарной кристаллографической ячейкой при $p = 3$.

б) Солитоны в альфа-спиральных белках

Рассмотрим коллективные возбужденные состояния альфа-спирального белка, соответствующие характеристическому колебанию Амид I с энергией $\mathcal{E}_0 = 0,21$ эВ и электрическим дипольным моментом перехода $d \approx 0,3$ Дебая *), направленным под малым углом к оси спирали. Согласно оценкам Невской и Чиргадзе ³⁹, энергия резонансного взаимодействия между соседними пептидными группами в одной цепочке — $J = 7,8$ см⁻¹. Энергия такого же взаимодействия между соседними пептидными группами из разных цепочек $L = 12,4$ см⁻¹.

*) Один Дебай равен произведению заряда протона на 10^{-8} см.

При исследовании коллективных возбуждений, соответствующих внутриспиральным колебаниям Амид I, в качестве модели белка будем рассматривать систему трех параллельных цепей пептидных групп (далее будем называть их просто молекулами), занимающих равновесные положения (3.1). Ограничимся учетом только резонансных взаимодействий J и L и двух типов смещений молекул, обусловленных изменением шага спирали $a \rightarrow a + u_{n\alpha}$ и изменением ее радиуса $R \rightarrow R + r_{n\alpha}$.

При таких упрощениях рассмотренная ранее функция Гамильтона (2.9) одной молекулярной цепочки заменится функцией

$$\mathcal{H} = \sum_{n\alpha} A_{n\alpha}^* \left\{ \left[\mathcal{E}_0 + W + \chi (\beta_{n+1, \alpha} - \beta_{n-1, \alpha}) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{2} \eta (2\gamma_{n\alpha} + \gamma_{n, \alpha+1} + \gamma_{n, \alpha-1}) \right] A_{n\alpha} - \right. \\ \left. - J (A_{n+1, \alpha} + A_{n-1, \alpha}) + L (A_{n, \alpha+1} + A_{n, \alpha-1}) \right\}, \quad (3.2)$$

где

$$W \equiv \frac{1}{2} \sum_{n\alpha} \left\{ M \left[\left(\frac{\partial \beta_{n\alpha}}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial \gamma_{n\alpha}}{\partial t} \right)^2 \right] + \right. \\ \left. + \kappa (\beta_{n\alpha} - \beta_{n-1, \alpha})^2 + \frac{1}{4} w (\gamma_{n\alpha} + \gamma_{n, \alpha-1})^2 \right\}. \quad (3.3)$$

В этих выражениях величина $|A_{n\alpha}(t)|^2$, нормированная условием

$$\sum_{n\alpha} |A_{n\alpha}(t)|^2 = 1, \quad (3.3a)$$

определяет вероятность возбуждения молекулы $n\alpha$ в искомом состоянии $|\psi(t)\rangle$. Функции $\beta_{n\alpha}(t)$ и $\gamma_{n\alpha}(t)$ характеризуют соответственно средние значения $u_{n\alpha}$ и $r_{n\alpha}$ в том же состоянии. По сравнению с (2.9) выражения (3.2) и (3.3) содержат новые величины: η — параметр связи внутримолекулярных возбуждений со смещениями γ , и w — коэффициент упругости по отношению к изменению радиуса спирали. Поскольку w определяется химическими силами, действующими между атомами основной белковой цепи, а κ — только более слабыми водородными связями, то выполняется неравенство

$$w \gg \kappa. \quad (3.4)$$

Функция (3.2) определяет гамильтоновы уравнения, которые в континуальном по n приближении и при малых скоростях перемещения возбуждений вдоль белка можно записать в виде

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - (\mathcal{E}_0 + W - 2J) + a^2 J \frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2\chi \rho_\alpha - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \eta (2\gamma_\alpha + \gamma_{\alpha+1} + \gamma_{\alpha-1}) \right] A_\alpha = L (A_{\alpha+1} + A_{\alpha-1}), \quad A_\alpha \equiv A_\alpha(z, t); \quad (3.5)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - V_0^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \rho_\alpha = - \frac{2\chi V_0^2}{\kappa} \frac{\partial^2}{\partial z^2} |A_\alpha|^2, \quad (3.6)$$

$$\rho_\alpha \equiv \rho_\alpha(z, t) = -a \frac{\partial \beta_\alpha(z, t)}{\partial z}, \quad (3.6a)$$

$$\frac{2M}{a^2} \frac{\partial^2 \gamma_\alpha}{\partial t^2} + w (2\gamma_\alpha + \gamma_{\alpha+1} + \gamma_{\alpha-1}) = \eta (2|A_\alpha|^2 + |A_{\alpha+1}|^2 + |A_{\alpha-1}|^2). \quad (3.7)$$

Условие нормировки (3.3a) теперь принимает вид

$$\frac{1}{a} \sum_{\alpha} \int |A_\alpha(z, t)|^2 dz = 1. \quad (3.8)$$

Учитывая трансляционную симметрию уравнений (3.5)—(3.7), можно искать их решения в виде возмущений, распространяющихся с постоянной скоростью V , меньшей скорости продольных звуковых волн $V_0 = a \sqrt{\kappa/M}$ и максимальной групповой скорости экситонов $V_g = 2aJ/\hbar$, в виде

$$A_\alpha(z, t) = C_\alpha \Phi(\xi) \exp \left\{ i \left[k(z - z_0) - \frac{Et}{\hbar} \right] \right\}, \quad (3.9)$$

$$\rho_\alpha(z, t) = \rho_\alpha(\xi), \quad \gamma_\alpha(z, t) = \gamma_\alpha(\xi), \quad (3.9a)$$

где

$$\xi = z - z_0 - Vt. \quad (3.10)$$

Вещественная функция $\Phi(\xi)$ определена выражением

$$\Phi(\xi) = \sqrt{\frac{aQ}{2}} \operatorname{sech} Q\xi \quad (3.11)$$

с подлежащим определению параметром Q .

Из условия нормировки (3.8) следует равенство

$$\sum_{\alpha} |C_{\alpha}|^2 = 1. \quad (3.12)$$

При учете (3.9) из уравнения (3.6) находим

$$\rho_{\alpha}(\xi) = \frac{2\chi |C_{\alpha}|^2}{\kappa(1-s)^2} \Phi^2(\xi). \quad (3.13)$$

Используя неравенство (3.4), можно пренебречь в (3.7) первым слагаемым, имеющим порядок $\kappa V/wV_0 \ll 1$. Тогда получаем

$$\gamma_{\alpha}(\xi) = \frac{\Phi^2(\xi) |C_{\alpha}|^2 \eta}{w}. \quad (3.14)$$

Подставив значения (3.9), (3.13) и (3.14) в уравнение (3.5) и выразив параметр резонансного взаимодействия J с помощью (2.35а) через эффективную массу экситона, получим систему уравнений *) для неизвестных коэффициентов C_{α} и параметра Q :

$$\left[E - (\mathcal{E}_0 + W - 2J) + \frac{\hbar^2}{2m_{\text{ex}}} (Q^2 - k^2) \right] C_{\alpha} = L (C_{\alpha+1} + C_{\alpha-1}), \quad (3.15)$$

$$\left[\frac{2\chi^2 |C_{\alpha}|^2}{\kappa(1-s)^2} + \frac{\eta^2}{4w} (2 |C_{\alpha}|^2 + |C_{\alpha+1}|^2 + |C_{\alpha-1}|^2) - \frac{\hbar^2 Q}{am_{\text{ex}}} \right] C_{\alpha} = 0. \quad (3.16)$$

Эта система уравнений вместе с условием (3.12) определяет три типа солитонов с значениями Q_i , ρ_{α}^i и γ_{α}^i , $i = 1, 2, 3$. Им соответствуют энергии

$$E_i(V) = \mathcal{E}_0 + W_i - 2J + \Delta_i + \frac{m_{\text{ex}} V^2}{2} - \frac{\hbar^2 Q_i^2}{2m_{\text{ex}}}, \quad (3.17)$$

$$\Delta_i \equiv -L, \quad 2L, \quad -L.$$

Входящие в это выражение энергии деформации молекулы W_i определены выражением (3.3). Пренебрегая малой производной $d\gamma_i/dt$ и переходя к непрерывному приближению, преобразуем (3.3) к виду

$$W_i = \frac{1}{2a} \sum_{\alpha} \int \left[M (V^2 + V_0^2) \frac{(\rho_{\alpha}^i)^2}{a^2} + \frac{w}{4} (\gamma_{\alpha}^i + \gamma_{\alpha-1}^i)^2 \right] dz. \quad (3.18)$$

*) Система уравнений (3.15), (3.16) получена в работе Еремко и Сергиенко ⁴⁰. При $\eta = 0$ они совпадают с уравнениями работы Еремко, Сергиенко и автора ⁴¹. Случай покоящихся солитонов рассмотрен в работе Супруна и автора ⁴².

Наконец, подставляя значения (3.13) и (3.14) и вычисляя интеграл, находим, используя неравенство (3.4), окончательное выражение

$$W_i = \frac{1}{3} a Q_i \left[\frac{2(s^2+1)\chi^2}{\kappa(1-s^2)} \sum_{\alpha} |C_{\alpha}^i|^4 + \frac{\eta^2}{4w} \sum_{\alpha} (|C_{\alpha}^i|^2 + |C_{\alpha-1}^i|^2) \right] \approx \approx \frac{2aQ_i(s^2+1)\chi^2}{3\kappa(1-s^2)} \sum_{\alpha} |C_{\alpha}^i|^4. \quad (3.19)$$

Для первого типа солитонов, названных в работе⁴¹ несимметричными солитонами, решение системы уравнений (3.15), —(3.16) имеет вид

$$C_{\alpha}^1 = 0, \quad C_{\alpha+1}^1 = -C_{\alpha-1}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (3.20)$$

$$Q_1 = \frac{am_{ex}}{\hbar^2} \left[\frac{\chi^2}{\kappa(1-s^2)} + \frac{3\eta^2}{8w} \right] \approx \frac{am_{ex}\chi^2}{\kappa(1-s^2)\hbar^2}. \quad (3.21)$$

В этом случае при $s^2 \ll 1$ энергия (3.17) может быть записана в виде

$$E_1(V) = E_1(0) + \frac{1}{2} m_{sol}^1 V^2, \quad (3.22)$$

где

$$E_1(0) = \mathcal{E}_0 - 2J - L - \frac{a^2 m_{ex} \chi^4}{6\kappa^2 \hbar^2} \quad (3.23)$$

— энергия покоящегося солитона;

$$m_{sol}^1 = m_{ex} \left(1 + \frac{a^2 \chi^4}{6\kappa^2 \hbar^2 V_0^2} \right) \quad (3.24)$$

— эффективная масса солитона.

Движение несимметричного солитона сопровождается локальной деформацией белковой молекулы. В области возбуждения расстояния между молекулами в двух цепях уменьшаются. Согласно (3.13) и (3.20), эти изменения определяются величинами

$$\rho_{\alpha}^1(\xi) = 0, \quad \rho_{\alpha\pm 1}^1(\xi) = \frac{a\chi Q_1}{2\kappa(1-s^2)\text{ch}^2 \xi Q} \quad (3.25)$$

Диаметр спирали в области возбуждения увеличивается, однако, также неравномерно. Как следует из (3.14), увеличение расстояний цепочек от центра спирали определяется выражениями

$$\gamma_{\alpha}^1(\xi) = 0, \quad \gamma_{\alpha\pm 1}^1(\xi) = \frac{a\eta Q_1}{2w \text{ch}^2 \xi Q_1} \quad (3.26)$$

Таким образом, спиральная молекула изгибается в области, охваченной возбуждением типа несимметричного солитона (см. рис. 6, в).

Рассмотренные решения (3.20) при постоянных значениях коэффициентов C_{α} являются приближенными. Они выделяют цепочку с номером α . Вследствие резонансного взаимодействия L между пептидными группами, входящими в состав разных цепочек, происходит обмен возбуждениями между цепочками, поэтому коэффициенты C_{α} должны зависеть от времени. Период обмена приближенно определяется величиной $T = 2\pi\hbar/L \approx 2,7 \cdot 10^{-12}$ с. Таким образом, движение несимметричного солитона вдоль молекулы должно иметь спиральный характер.

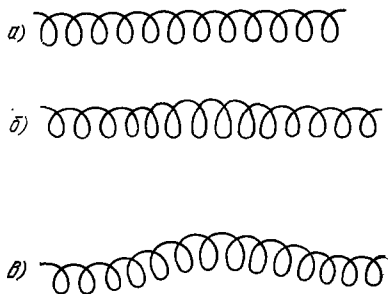


Рис. 6. а) Невозбужденная спиральная белковая молекула; б) возбуждение в молекуле симметричного солитона; в) возбуждение несимметричного солитона.

Эффект обмена возбуждениями между цепочками впервые был рассмотрен Скоттом ⁴³⁻⁴⁵, который использовал его для интерпретации экспериментальных исследований Вебба ⁴⁶, изучавшего рассеяние лазерного излучения метаболически активными бактериями (см. гл. 3 раздел в)).

В случае возбуждений второго типа (симметричных солитонов) решения системы уравнений (3.15), (3.16) имеют вид

$$C_{\alpha}^{(2)} = C_{\alpha \pm 1}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad (3.27)$$

$$Q_2 = \frac{am_{ex}}{3\hbar^2} \left[\frac{2\chi^2}{\kappa(1-s^2)} + \frac{\eta^2}{w} \right] \approx \frac{2m_{ex}a\chi^2}{3\kappa\hbar^2(1-s^2)}. \quad (3.28)$$

При $s^2 \ll 1$ энергия таких солитонов определяется выражением

$$E_2(V) = E_2(0) + \frac{1}{2} m_{sol}^{(2)} V^2, \quad (3.29)$$

где

$$E_2(0) = \mathcal{E}_0 - 2J + 2L - \frac{2m_{ex}a^2\chi^4}{27\kappa^2\hbar^2}, \quad (3.30)$$

$$m_{sol}^{(2)} = m_{ex} \left(1 + \frac{2a^2\chi^4}{27\kappa^2\hbar^2V_0^2} \right). \quad (3.31)$$

При этом в области возбуждения расстояния между молекулами в трех цепочках симметрично уменьшаются:

$$\rho_{\alpha}^{(2)}(\zeta) = \rho_{\alpha \pm 1}^{(2)}(\zeta) = \frac{a\chi Q_2}{3\kappa(1-s^2)\text{ch}^2\zeta Q_2}, \quad (3.32)$$

а диаметр спирали увеличивается (см. рис. 6б)

$$\gamma_{\alpha}^{(2)}(\zeta) = \gamma_{\alpha \pm 1}^{(2)}(\zeta) = \frac{a\eta Q_2}{6w\text{ch}^2\zeta Q_2}. \quad (3.33)$$

Наконец, третий тип решений системы уравнений (3.15) и (3.16) можно записать в виде

$$C_{\alpha}^{(3)} = 3^{-1/2} \exp\left(\frac{i2\pi\alpha}{3}\right), \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (3.34)$$

$$Q_3 = \frac{am_{ex}}{3\hbar^2} \left[\frac{2\chi^2}{\kappa(1-s^2)} + \frac{\eta^2}{w} \right] \approx \frac{2m_{ex}a\chi^2}{3\kappa\hbar^2(1-s^2)}. \quad (3.35)$$

В этом случае, при $s^2 \ll 1$, энергия солитона определяется выражением

$$E_3(V) = E_3(0) + \frac{1}{2} m_{sol}^{(3)} V^2, \quad m_{sol}^{(2)} = m_{sol}^{(3)}, \quad (3.36)$$

где

$$E_3(0) = \mathcal{E}_0 - 2J - L - \frac{2m_{ex}a^2\chi^4}{27\kappa^2\hbar^2}. \quad (3.37)$$

Таким образом, эффективные массы и пространственное протяжение солитонов второго и третьего типов совпадают. Однако возбуждения отдельных цепочек у солитонов третьего типа сдвинуты по фазе (см. (3.34)). В связи с этим их энергии на величину $3L$ меньше энергий симметричных солитонов.

Несимметричные солитоны более компактны ($Q_1 > Q_2 = Q_3$), они обладают значительно меньшей энергией и большей эффективной массой. Таким образом, из трех возможных типов солитонов, переносящих через белковую молекулу энергию вибрационного возбуждения Амид I, наиболее устойчивыми являются несимметричные солитоны. Они могут переносить без потерь вибрационную энергию Амид I.

в) Численные расчеты
солитонных возбуждений
в дискретных белковых молекулах

Во всех предыдущих вычислениях для получения аналитических результатов использовалась модель бесконечной цепочки в континуальном приближении. При исследовании более реальных дискретных цепочек конечного размера приходится проводить с помощью современных ЭВМ численное интегрирование соответствующих систем уравнений. В случае спиральных белковых молекул, моделируемых тремя дискретными цепями пептидных групп, удерживаемых водородными связями, такие уравнения непосредственно следуют из функции Гамильтона (3.2). В случае $\eta = 0$ соответствующие уравнения впервые были получены в работе Еремко, Сергиенко и автора ⁴¹. Они имеют вид

$$i\hbar \frac{dA_{n\alpha}}{dt} = [\mathcal{E}_0 + W + \chi(\beta_{n+1, \alpha} - \beta_{n-1, \alpha})] A_{n\alpha} - J(A_{n-1, \alpha} + A_{n+1, \alpha}) + L(A_{n, \alpha+1} + A_{n, \alpha-1}), \quad (3.38)$$

$$M \frac{d^2\beta_{n\alpha}}{dt^2} - \kappa(\beta_{n+1, \alpha} - 2\beta_{n, \alpha} + \beta_{n-1, \alpha}) = \chi(|A_{n+1, \alpha}|^2 - |A_{n-1, \alpha}|^2), \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (3.39)$$

Входящая в (3.38) величина W определена выражением

$$W = \frac{1}{2} \sum_{n\alpha} \left[M \left(\frac{d\beta_{n\alpha}}{dt} \right)^2 + \kappa(\beta_{n, \alpha} - \beta_{n-1, \alpha})^2 \right].$$

Численное интегрирование уравнений (3.38), (3.39) было выполнено Гайманом, Мак-Лафлином и Скоттом ⁴⁷ с помощью ЭВМ Лос-Аламосской научной лаборатории в 1979 г. Они исследовали возбужденные состояния в трех цепях спиральной белковой молекулы. Каждая цепь содержала 200 пептидных групп. Молекула характеризовалась величинами: $E_0 = 0,205$ эВ; $M = 70$ масс протона; $V_0 \approx 10^6$ см/с; $J = 1,55 \cdot 10^{-22}$ Дж, $L = 2,46 \cdot 10^{-22}$ Дж. В качестве начальных условий при $t = 0$ использовались:

$$A_{n\alpha} = \begin{cases} 1 & \text{для } n = 1, \\ 0 & \text{для } n \neq 1, \end{cases} \quad \beta_{n\alpha} = 0. \quad (3.40)$$

Вычисления проводились для разных значений параметра связи χ внутривептидных возбуждений Амид I со смещениями их равновесных положений. Было показано, что при начальных условиях (3.40) в молекуле образуются и перемещаются хорошо выраженные солитоны при значениях $\chi \geq 3 \cdot 10^{-11}$ Н*).

Солитоны с близкими к критическому значению χ перемещаются со скоростью $\sim 1,26 \cdot 10^3$ м/с. Следовательно, расстояние 1700 Å, соответствующее длине альфа-спиральной миозиновой молекулы в мышечных волокнах (см. разд. 4), солитоны могли бы проходить (без учета сил трения и производимой ими работы) за 130 пс.

*) Использованное в расчетах значение скорости V_0 слишком преувеличено. Скорость продольного звука в спиральных белковых молекулах определяется слабыми водородными связями между пептидными группами. Поэтому V_0 должно быть порядка 10^4 см/с. Следовательно, критическое значение χ для образования солитонов будет меньше.

Авторы ⁴⁷ приходят к заключению, что «численные исследования давидовской нелинейной динамической модели альфа-спиральных белков подтверждают его предсказания об образовании солитонов».

Работа ⁴⁷ интересна тем, что в ней проведено исследование процесса формирования солитонов из определенного начального состояния и выяснена роль дискретности цепочки, которая, по-видимому, сводится к тому, что солитоны образуются в цепи только при сверхкритических значениях параметра связи χ , определяющего нелинейность системы.

В 1979 г. Эйлбек, при консультации со Скоттом, сделал компьютерный фильм ⁴⁸, демонстрирующий распространение вдоль цепи ПГ (пептидных групп) внутреннего вибрационного возбуждения краевой группы. Этот фильм наглядно показывает, что при сверхпороговом значении параметра связи χ вибрационного возбуждения со смещениями ПГ вдоль молекулы распространяется возбуждение в виде солитона, т. е. в виде локального импульса, форма которого и ширина остаются неизменными при движении. Фильм Эйлбека важен по двум причинам: во-первых, он подтверждает прежние вычисления, выполненные в лаборатории Лос-Аламоса; во-вторых, он наглядно демонстрирует устойчивость солитонов к взаимодействию со звуковыми волнами. Звуковая волна возбуждалась вместе с солитоном. Двигаясь быстрее солитона, она несколько раз отражалась от концов цепочки, проходя через солитон и не вызывая его изменения.

Фильм Эйлбека и численные расчеты ⁴⁷ показывают, что солитон формируется в самом начале пептидной цепи. Следовательно, солитоны могут возникать в сравнительно коротких участках альфа-спиральных белков.

Обнаруженная при численных расчетах необходимость превышения некоторого порогового значения параметра связи χ для возбуждения солитона, как показано в работе Брижик и автора ⁴⁹ (см. гл. 6 этого обзора), обусловлена условиями возбуждения солитона. В континуальном приближении в цепочке бесконечных размеров медленные солитоны могут существовать при любых значениях χ . По мере уменьшения χ свойства солитонов непрерывно приближаются к свойствам экситонов.

При континуальном описании не учитывается роль коротковолновых смещений. Такие смещения приводят к эффективному уменьшению резонансного диполь-дипольного взаимодействия между ПГ. В работе автора ⁵⁰ смещение пептидных групп описывалось на языке квантовой теории с учетом коротковолновых смещений. Было показано, что плавное изменение величины связи экситона (электрона) с акустическими фононами может приводить к скачкообразному изменению параметров нелинейного уравнения — величины резонансного взаимодействия (эффективной массы экситона) и коэффициента нелинейности. В легко деформируемых системах значительная автолокализация осуществляется скачком, если параметр связи превышает критическое значение. Вопрос о скачкообразном переходе в автолокализованное состояние рассматривался Тоязавой еще в 1961 г.

В последнее время появились указания на проявление солитонов в некоторых биологических явлениях. Так, например, Скотт ⁴³⁻⁴⁵ использовал теорию солитонов для объяснения интересных экспериментальных результатов, полученных Веббом ⁴⁶ при исследовании рамановского рассеяния лазерного излучения бактериями кишечной палочки (*E. Coli*). В рассеянном спектре появлялись антистоксовы частоты в интервале 40—200 см⁻¹ только в том случае, когда бактерии находились в метаболически активном состоянии. Скотт утверждает, что эти частоты обусловлены вибрационными состояниями солитонов, возникающих в живых бактериях при химических реакциях.

Согласно численным оценкам Скотта⁴³⁻⁴⁵ движение солитона вдоль альфа-спирального белка характеризуется двумя внутренними периодами — периодом $T_1 = 2 \cdot 10^{-16}$ с, соответствующим времени перескока солитона с одной цепи водородных связей на другую, и периодом $T_2 = 8/3 \times 10^{-13}$ с, обусловленным дискретностью этих цепей. Таким периодам соответствуют частоты $E_1 = 17 \text{ см}^{-1}$ и $E_2 = 125 \text{ см}^{-1}$. Суммы и разности этих частот удивительным образом совпадают с экспериментально найденными Веббом. На этом основании Скотт приходит к заключению⁴⁵, что «рамановская спектроскопия может дать прямое экспериментальное указание на функциональную роль давидовских солитонов в метаболических процессах».

В работе итальянских ученых⁵¹ использовались солитоны для объяснения изменений в некотором температурном интервале рамановского спектра лазерного излучения, рассеянного зелеными водорослями (*Chlorella pyrenoidosa*).

4. СОЛИТОНЫ И МОЛЕКУЛЯРНЫЙ МЕХАНИЗМ МЫШЕЧНОГО СОКРАЩЕНИЯ

Одной из наиболее интересных проблем биофизики является выяснение молекулярных основ превращения химической энергии гидролиза молекул АТФ в механическую энергию процессов движения. В настоящее время лучше всего изучены поперечнополосатые мышцы, из которых состоит вся скелетная мускулатура и сердечная мышца позвоночных животных, человека и некоторых беспозвоночных. Представление о движении солитонов в спиральных белковых молекулах автор использовал для объяснения на молекулярном уровне механизма сокращения поперечнополосатых мышц. Для понимания идеи, положенной в основу этого объяснения, напомним вначале основные сведения о строении таких мышц.

а) Строение поперечнополосатых мышц

Основным сократительным элементом мышцы является мышечное волокно. Оно является самостоятельной очень длинной и тонкой (диаметр 20—80 мкм) клеткой со многими ядрами. Внутренняя часть этой клетки представляет собой пучок из нескольких тысяч плотно упакованных, параллельно расположенных нитей — миофибрилл диаметром 1—2 мкм. Каждая миофибрилла состоит из правильно чередующихся участков — саркомеров (рис. 7, а). Саркомер является наименьшим элементарным участком мышцы, способным к сокращению длины.

Саркомеры отделены друг от друга поперечными мембранами, получившими название z-пластинок. В обе стороны от z-пластинок тянутся внутрь саркомера тонкие белковые нити (рис. 7, б), в состав которых входят белки: актин, тропомиозин и тропонин. Они проникают частично в пространство между толстыми нитями, расположенными во внутренней области саркомера (см. рис. 7, б). Тонкие и толстые нити окружены жидкой средой — саркоплазмой, в которой находятся молекулы АТФ, ионы Mg^{2+} и некоторые другие.

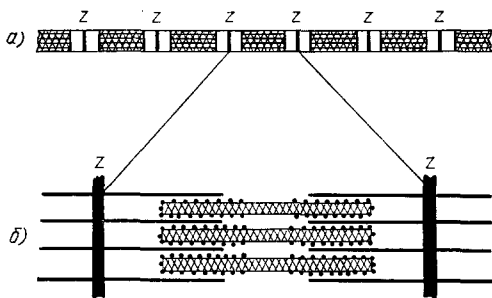


Рис. 7. а) Миофибрилла мышечного волокна, разделенная мембранами z на саркомеры; б) схема строения одного саркомера.

б) Современные модели, объясняющие механизм мышечного сокращения

Сокращение длины саркомеров и, следовательно, длины мышечного волокна происходит в момент, когда под влиянием нервного импульса из особых микротрубок поступают в саркоплазму ионы кальция. Ионы кальция стимулируют процесс гидролиза молекул АТФ в местах соприкосновения толстых и тонких белковых нитей.

С помощью электронно-микроскопических исследований Г. Хаксли и Хансон⁵² и А. Хаксли и Нидергерке⁵³ в 1954 г. установили, что сокра-

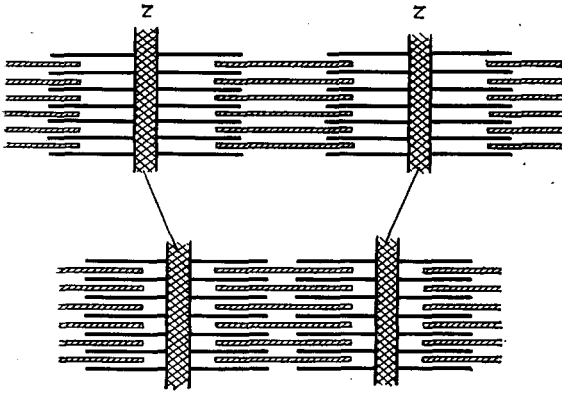


Рис. 8. Иллюстрация модели скольжения тонких нитей относительно толстых в саркомере.

щение длины саркомера связано с проникновением тонких нитей в пространство между толстыми нитями без сокращения длины самих нитей (рис. 8). Такая «модель скольжения» тонких белковых нитей относительно толстых получила вскоре всеобщее признание. Экспериментально установленная модель сокращения длины саркомеров поставила перед исследователями весьма важную задачу — дать на молекулярном уровне объяснение механизму скольжения. Какие силы вызывают скольжение

тонких нитей относительно толстых? Как энергия гидролиза молекул АТФ преобразуется в энергию скольжения? В настоящее время среди биологов распространено убеждение, что скольжение тонких нитей относительно толстых обусловлено активным движением «голов» миозиновых молекул, из которых образованы толстые нити.

Молекула миозина с молекулярным весом около 500 000 походит на тонкий прут диаметром $\sim 40 \text{ \AA}$ и длиной $\sim 1700 \text{ \AA}$ с утолщением на одном конце, называемым «головой» молекулы. Основная часть молекулы называется «хвостом». Молекула образована двумя полипептидными цепями, имеющими на большом протяжении конформацию альфа-спиралей. В толстой нити, имеющей форму длинной сигары, содержится около 400 молекул миозина. Они укладываются так, что головы молекул направлены к обоим концам толстой нити, выступая на ее поверхность, а хвосты — к середине (см. рис. 7).

Предполагается, что при гидролизе молекулы АТФ, прикрепленной к голове миозиновой молекулы, последняя удлиняется, образуя связь («мостик») с глобулярной молекулой актина, входящей в состав тонкой нити; затем голова поворачивается, передвигая к центру саркомера тонкую нить, и, наконец, отсоединяется от актиновой молекулы, возвращаясь к прежнему размеру и положению в толстой нити. Присоединив новую молекулу АТФ, она может повторить этот цикл, если в саркомере имеются ионы кальция. Такие движения головы миозиновой молекулы иллюстрирует рис. 9, заимствованный нами из обзора Марей и Вебера⁵⁴.

Согласно этой модели, скольжение тонких нитей относительно толстых напоминает движение воды около лодки с гребцами, сидящими на

тонких нитей в пространстве между толстыми нитями без сокращения длины самих нитей (рис. 8). Такая «модель скольжения» тонких белковых нитей относительно толстых получила вскоре всеобщее признание. Экспериментально установленная модель сокращения длины саркомеров поставила перед исследователями весьма важную задачу — дать на молекулярном уровне объяснение механизму скольжения. Какие силы вызывают скольжение

концах лодки лицом друг к другу. Роль весел играют головы миозиновых молекул. Поэтому такую модель можно назвать «весельной моделью».

Представление о мостиках между толстыми и тонкими нитями, которые замыкаются, тянут волокна, вызывая их смещение, а затем разрываются, не объясняют молекулярную природу явления. Остаются нерешенными вопросы, как энергия гидролиза АТФ расходуется на удлинение, образование связи, тянущее усилие и разрыв мостиков. Каков молекулярный механизм изменений в голове миозиновой молекулы, приводящий к этим явлениям? И, наконец, почему только голова огромной миозиновой молекулы принимает активное участие в механизме сокращения?

в) Новая гипотеза о механизме мышечного сокращения

Базируясь на теоретических исследованиях солитонов в спиральных белках (см. раздел б) гл. 3), автор предложил новую гипотезу для объяснения механизма сокращения длины саркомеров мышечных волокон^{35,37, 55-59}. Согласно этой гипотезе, ионы кальция, поступающие в саркомер вблизи z-пластинок, диффундируют к центру саркомера и, достигая первого ряда голов миозиновых молекул на концах толстых нитей, вызывают гидролиз прикрепленных к ним молекул АТФ. Выделяющаяся энергия порождает несимметричные солитоны, которые перемещаются от голов молекул к их концам. Как было показано в разделе б) гл. 3, движение несимметричного солитона сопровождается локальным расширением и изгибом молекулы. Поэтому в области возбуждений, пробегающих по

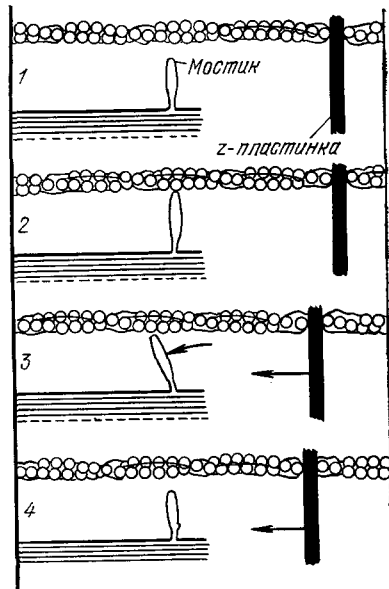


Рис. 9. Феноменологическая модель сокращения длины саркомеров поперечнополосатых мышц. Показано движение одной головы миозиновой молекулы, приводящее к смещению z-пластинки. Рисунок заимствован из обзора⁶⁴.

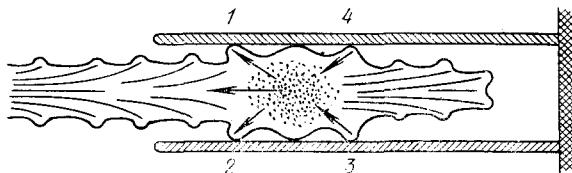


Рис. 10. Движение солитонов, возникающих на головах миозиновых молекул вдоль хвостов молекул внутри толстой нити приводит к ее расширению и перемещению расширенной части к центру саркомера.

Стрелками 1—4 указаны направления движения голов миозиновых молекул при перемещении расширенной области.

пучку миозиновых молекул, толстая нить расширяется (рис. 10). В результате расширения толстых нитей головы миозиновых молекул, находясь на их поверхности, прижимаются к тонким нитям. При движении «распухших» областей толстых нитей к середине саркомера они увлекают за собой тонкие нити. Гидролиз молекул АТФ на втором ряду голов миозиновых молекул порождает новые солитоны. Их движение внутри тол-

стых нитей вызывает движение новых распухших областей толстых нитей, которые также смещают тонкие нити к центру саркомера. Гидролиз других молекул АТФ приводит к дополнительному смещению и т. д.

Согласно предложенной нами модели, головы миозиновых молекул прижимаются к тонким нитям, проталкивают их на небольшом расстоянии и отходят от них (как в модели образования и разрыва мостиков). Однако это движение обусловлено не удлинением, поворотом и сокращением самих голов, а продвижением внутри толстой нити волны возбуждения и деформации в виде солитонов. При этом кинетическая энергия солитонов пре-

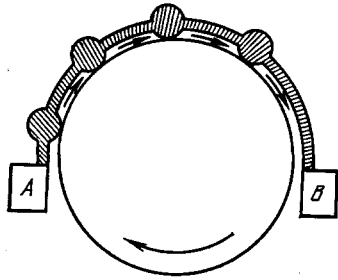


Рис. 11. Принципиальная схема простейшего вибродвигателя Рагульскиса.

образуется в энергию сокращения или приводит к натяжению, если мышца находится под нагрузкой. В такой модели активными элементами сокращения являются все части миозиновой молекулы, а не только ее голова.

Затрачивая свою кинетическую энергию на работу, необходимую для сокращения мышечного волокна, солитоны тормозятся и, остановившись вблизи центров толстых нитей, гибнут, передавая энергию покоя тепловому движению. Таким образом, при сокращении мышечных волокон используется только кинетическая энергия солитонов.

Если учесть, что при гидролизе молекул АТФ выделяется $\sim 0,43$ эВ, а внутренняя энергия солитона $\sim 0,20$ эВ, то максимальный коэффициент полезного действия при мышечном сокращении составит около 50%.

Хорошей макроскопической иллюстрацией механизма перемещения тонких нитей саркомера вследствие движения распухшей области толстых нитей, в которых возбуждаются солитоны, могут служить вибротомоторы Рагульскиса и его сотрудников из научно-исследовательского института «Вибротехника» Каунасского политехнического института^{60,61}. В этих моторах возбуждаемые в пьезоэлектрических пленках упругие колебания в виде импульсов перемещаются вдоль их поверхности и вызывают под влиянием трения скольжения вращение или перемещение соприкасающихся с ними тел. На рис. 11 указана принципиальная схема простейшего вибродвигателя. Во входном устройстве А возбуждаются упругие импульсы. Возникающие выпуклости, перемещаясь вдоль пленки до поглощающего выходного устройства В, вызывают вследствие трения скольжения вращение цилиндра.

5. ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОЛИТОНОВ

Возможность использования понятия солитона для объяснения некоторых явлений в физике, биологии и других науках неизбежно связана с исследованием динамических свойств солитонов и причин, приводящих к нелинейности и дисперсии. Динамические свойства солитонов проявляются при их взаимодействии с внешними полями и другими степенями свободы систем, обуславливающими процессы их релаксации. Математическое исследование таких взаимодействий обычно проводится методами теории возмущений.

Различные варианты теории возмущений для солитонов в одномерных системах развивались Карпманом и Масловым⁶², Бишопом и Крумханслом с сотрудниками⁶³, Кинером и Маклафлином⁶⁴ и другими исследователями. В этом разделе мы изложим результаты исследований Еремко

и автора⁸⁵, изучавших влияние внешних воздействий на солитоны, возникающие при локальных возбуждениях в молекулярных квазиодномерных цепях.

а) С в о б о д н ы е с о л и т о н ы
п р и м а л ы х с к о р о с т я х д в и ж е н и я

Как было показано в гл. 2, свойства свободных солитонов в молекулярной цепочке определяются системой уравнений (2.11) и (2.12) при условии нормировки (2.8). При выполнении условия $V_0 < 2aJ/\hbar$, характеризующего мягкие цепочки при сильном резонансном диполь-дипольном взаимодействии, эта система в континуальном приближении преобразуется к виду

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_{\text{ex}}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - [E_{\text{ex}}(0) + W] - 2\chi a \frac{\partial \beta(z, t)}{\partial z} \right\} A(z, t) = 0, \quad (5.1)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - V_0^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \beta(z, t) - \frac{2a\chi}{M} \frac{\partial}{\partial z} |A(z, t)|^2 = 0. \quad (5.2)$$

$$W \equiv \frac{1}{2a} \int \left[M \left(\frac{\partial \beta}{\partial t} \right)^2 + \kappa a^2 \left(\frac{\partial \beta}{\partial z} \right)^2 \right] dz; \quad (5.3)$$

здесь m_{ex} — эффективная масса экситона, $E_{\text{ex}}(0)$ — энергия дна экситонной зоны.

Если ввести преобразование

$$A(z, t) = \sqrt{a} B(z, t) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} [E_{\text{ex}}(0) + W] \right\}$$

и функцию

$$\rho(z, t) = -a \frac{\partial \beta(z, t)}{\partial z}, \quad (5.4)$$

характеризующую уменьшение межмолекулярных расстояний, то система уравнений (5.1), (5.2) преобразуется к виду

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_{\text{ex}}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2\chi \rho(z, t) \right] B(z, t) = 0, \quad (5.5)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - V_0^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \rho(z, t) + \frac{2\chi a}{\kappa} V_0^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} |B(z, t)|^2 = 0. \quad (5.6)$$

При этом в соответствии с (2.8) выполняется условие

$$\int |B(z, t)|^2 dz = 1. \quad (5.7)$$

В случае возбуждений, движущихся с постоянными скоростями V , значительно меньшими скорости продольного звука V_0 , из уравнения (5.6) получим

$$\rho(z, t) = \frac{2a\chi |B(z, t)|^2}{\kappa}, \quad V \ll V_0. \quad (5.8)$$

Подставив (5.8) в уравнение (5.5), получаем нелинейное уравнение Шрёдингера

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_{\text{ex}}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + g |B(z, t)|^2 \right) B(z, t) = 0, \quad (5.9)$$

где параметр нелинейности

$$g = \frac{4\chi^2 a}{\kappa}. \quad (5.10)$$

Нормированное условием (5.7) решение этого уравнения имеет вид

$$B_0(z, t) = \frac{\sqrt{q} \exp \{ i [k(z - \xi) + \Theta] \}}{\sqrt{2} \operatorname{ch} [q(z - \xi)]}, \quad (5.11)$$

в котором

$$\zeta \equiv z_0 + \frac{\hbar k t}{m_{\text{ex}}}, \quad \Theta = \frac{\hbar (k^2 + q^2) t}{2m_{\text{ex}}}, \quad q = \frac{2\alpha\chi^2 m_{\text{ex}}}{\chi\hbar^2}. \quad (5.12)$$

Функция (5.11) изображает уединенную волну (солитон) с максимумом огибающей при $z = \zeta$ и фазой Θ , перемещающуюся вдоль оси z с постоянной скоростью

$$V = \frac{\hbar k}{m_{\text{ex}}}. \quad (5.13)$$

б) Д в и ж е н и е с о л и т о н о в п р и н а л и ч и и с и л т р е н и я

Если молекулярная цепочка находится в некоторой среде, то на движущийся солитон будет действовать сила трения и он будет тормозиться. Это торможение можно учесть, вводя в правую часть уравнения (5.2), определяющего смещения равновесных положений молекул, диссипативные члены. При наличии сил трения, пропорциональных скорости смещений ($\varepsilon\gamma \partial\beta/\partial t$), уравнение (5.6) преобразуется к виду

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - V_0^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \rho(z, t) + \frac{2\alpha V_0^2 \chi}{\chi} \frac{\partial^2}{\partial z^2} |B|^2 = -\varepsilon\gamma \frac{\partial \rho}{\partial t}, \quad (5.14)$$

где ε — малый положительный параметр. Следовательно, при наличии трения движение солитона определяется системой уравнений (5.9) и (5.14).

Для решения этой системы уравнений в работе А. Еремко и автора⁶⁵ использовался метод «медленно меняющихся коэффициентов», введенный Ван-дер-Полем и подробно разработанный Н. Н. Боголюбовым и Ю. А. Митропольским⁶⁶.

Предположим, что при $t = 0$ солитон описывался функцией (5.11) при значении $k = k_0$. Чтобы определить, как изменяется эта функция под влиянием сил трения, будем искать решение системы уравнений (5.9) и (5.14) в виде

$$B(z, t) = B_0(z, t) + \varepsilon B_1(z, t), \quad (5.15)$$

$$\rho(z, t) = \rho_0(z, t) + \varepsilon \rho_1(z, t), \quad (5.16)$$

где

$$\rho_0(z, t) = \frac{2\chi\alpha |B_0(z, t)|^2}{\chi}, \quad (5.17)$$

а функция $B_0(z, t)$ совпадает с выражением (5.11), в котором изменяющиеся с течением времени значения k , ζ и Θ определяются уравнениями

$$\frac{dk}{dt} = \varepsilon f(k), \quad (5.18)$$

$$\frac{d\zeta}{dt} = \frac{\hbar k}{m_{\text{ex}}}, \quad \frac{d^2\zeta}{dt^2} = \frac{\varepsilon \hbar f'(k)}{m_{\text{ex}}}, \quad (5.19)$$

$$\frac{d\Theta}{dt} = \frac{\hbar (k^2 + q^2)}{2m_{\text{ex}}} + \varepsilon \varphi(k). \quad (5.20)$$

Таким образом, задача сводится к определению неизвестных функций $f(k)$, $\varphi(k)$ и $B_1(z, t)$ при дополнительном требовании, чтобы функция $B_1(z, t)$ не включала слагаемых, содержащих производные $\partial B_0/\partial \zeta$ и $\partial B_0/\partial \Theta$. Эти слагаемые квадратично возрастают с течением времени и называются секулярными членами⁶⁶.

Подставив выражение (5.16) при значениях (5.17) и (5.11) в уравнение (5.14) и сохранив члены первого порядка по ε , получим при слабой

зависимости $\rho_1(z, t)$ от времени

$$\rho_1(z, t) = -\frac{ah\chi \operatorname{sh}[q(z-\zeta)]}{\kappa V_0^2 m_{\text{ex}} \operatorname{ch}^2[q(z-\zeta)]} [\gamma k + f(k)]. \quad (5.21)$$

В качестве следующего шага подставим выражения (5.15) и (5.16) в уравнение (5.9). Учитывая (5.21) и (5.18), получим уравнение, определяющее функцию $B_1(z, t)$:

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m_{\text{ex}}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{8a\chi^2}{\kappa} |B_0(z, t)|^2 \right] B_1(z, t) + \frac{4a\chi^2 B_0^2 B_1^*}{\kappa} = F(B_0), \quad (5.22)$$

где

$$F(B_0) \equiv [f(k)(z-\zeta) + \varphi(k) - 2\chi\rho_1(z, t)] B_0(z, t). \quad (5.23)$$

Условия отсутствия в $B_1(z, t)$ секулярных членов сводятся к требованиям ортогональности функции $F(B_0)$ функциям $\partial B_0/\partial \zeta$ и $\partial B_0/\partial \Theta$. Выполнение этих условий приводит к уравнениям, определяющим вместе с (5.21) неизвестные функции

$$f(k) \int \operatorname{th}[q(z-\zeta)] \operatorname{th}[(z-\zeta)] |B_0(z, t)|^2 dz = \\ = \frac{2\chi}{\hbar} \int |B_0(z, t)|^2 \rho_1(z, t) \operatorname{th}[q(z-\zeta)] dz, \quad (5.24)$$

$$\varphi(k) = \frac{2\chi}{\hbar} \int |B_0(z, t)|^2 \rho_1(z, t) dz. \quad (5.25)$$

После вычисления интегралов находим

$$\varphi(k) = 0, \quad f(k) = \frac{\kappa\gamma D}{1+D}, \quad (5.26)$$

где

$$D \equiv \frac{m_{\text{sol}} - m_{\text{ex}}}{m_{\text{ex}}}. \quad (5.27)$$

Подставив значение (5.26) в (5.18), получим после интегрирования и учета равенства (5.13) закон убывания скорости солитона при наличии сил трения, пропорциональных скорости

$$V(t) = V_0 \exp(-\alpha t), \quad (5.28)$$

где

$$\alpha = \frac{\varepsilon\gamma(m_{\text{sol}} - m_{\text{ex}})}{m_{\text{sol}}}. \quad (5.29)$$

Если сила трения пропорциональна квадрату скорости ($-\varepsilon\lambda \times (\partial\beta/\partial t)^2$) и направлена противоположно ей, то уравнение (5.14) заменяется уравнением

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - V_0^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \rho(z, t) + \frac{2a\gamma V_0^2}{\kappa} \frac{\partial^2}{\partial z^2} |B(z, t)|^2 = -\varepsilon\lambda \frac{V}{a} \frac{\partial \rho^2(z, t)}{\partial t}.$$

В этом случае аналогичными вычислениями находим, что закон убывания скорости солитона определяется выражением

$$V(t) = \frac{V_0}{1 - \beta V_0 t} \approx V_0 (1 - \beta V_0 t), \quad (5.30)$$

где

$$\beta = \frac{\varepsilon\lambda 16\chi^3 a q^2}{15m_{\text{sol}} \kappa^2 V_0^2}. \quad (5.31)$$

Таким образом, характер уменьшения скорости близок к линейному с коэффициентом пропорциональности βV_0^2 .

в) Движение солитонов под действием внешних неоднородных полей

Влияние внешних неоднородных полей или локальных неоднородностей в расположении молекул можно учесть, введя в уравнение (5.1), наряду с энергией $E_{\text{ex}}(0)$, дополнительное слагаемое $\varepsilon U(z)$, зависящее от координаты z . В этом случае система уравнений для солитона, перемещающегося вдоль цепочки молекул со скоростью $V \ll V_0$, имеет вид

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2\chi\rho(z, t) \right] B(z, t) = \varepsilon U(z) B(z, t), \quad (5.32)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - V_0^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \rho(z, t) + \frac{2\chi a}{\kappa} V_0^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} |B(z, t)|^2 = 0. \quad (5.33)$$

Решение этой системы в первом приближении можно искать также в виде (5.15) — (5.17). В этом случае из (5.32) и (5.33) следуют уравнения

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_{\text{ex}}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{4a\chi^2}{\kappa} |B(z, t)|^2 \right) B(z, t) = \varepsilon [U(z) + \rho_1(z, t)] B(z, t), \quad (5.34)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - V_0^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \rho_1 = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{d^2 \zeta}{dt^2} \frac{\partial \rho_0}{\partial \zeta}. \quad (5.35)$$

Используя слабую зависимость функции $\rho_1(z, t)$ от времени, явный вид (5.11) и значение $d^2 \zeta / dt^2$ из (5.19), после интегрирования (5.35) получаем

$$\rho_1(z, t) = -\frac{\hbar a \chi}{\kappa m_{\text{ex}} V_0^2} f(k) \text{th} [q(z - \zeta)]. \quad (5.36)$$

Подставив (5.15) и (5.36) в (5.34), преобразуем уравнение (5.34) к виду

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_{\text{ex}}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{8a\chi^2}{\kappa} |B_0|^2 \right) B_1 + \frac{4a\chi^2}{\kappa} B_0^2 B_1^* = \tilde{F}(B_0),$$

где

$$\tilde{F}(B_0) \equiv [U(z) - 2\chi\rho_1 + (z - \zeta) f(k) + \varphi(k)] B_0(z, t). \quad (5.37)$$

Из условий отсутствия в $B_1(z, t)$ членов, возрастающих с течением времени, получаем два уравнения:

$$\varphi(k) = -\frac{1}{\hbar} \int |B_0(z, t)|^2 U(z) dz, \quad (5.38)$$

$$f(k) = -\frac{2q}{\hbar(1+D)} \int |B_0(z, t)|^2 U(z) \text{th} [q(z - \zeta)] dz, \quad (5.39)$$

где D определено выражением (5.27). Подставив это значение в уравнение (5.19) и учтя равенство $m_{\text{ex}}(1+D) = m_{\text{sol}}$, получим уравнение, определяющее движение центра солитона, т. е. максимума огибающей уединенной волны:

$$m_{\text{sol}} \frac{d^2 \zeta}{dt^2} = F(\zeta), \quad (5.40)$$

где

$$F(\zeta) \equiv -2\varepsilon q \int |B_0(z, t)|^2 U(z) \text{th} [q(z - \zeta)] dz. \quad (5.41)$$

Оно напоминает уравнение Ньютона для частицы с массой солитона. На солитон оказывает влияние потенциальное поле $U(z)$ со всей области, где $|B_0|^2 \neq 0$. При этом из области $z > \zeta$ потенциал $U(z)$ вносит вклад с отрицательным знаком, а из области $z < \zeta$ — с положительным знаком. Весьма существенно, что уравнение (5.40) содержит эффективную массу

солитона, а не эффективную массу экситона, входящую непосредственно в уравнение (5.32). Это обусловлено тем, что нелинейность рассматриваемого коллективного возбуждения определяется взаимодействием экситона с им же создаваемой локальной деформацией цепи, инерционные свойства которой изменяют эффективную массу свободного экситона.

В ряде работ ^{67, 68} влияние возмущения на нелинейное уравнение Шредингера исследуется путем решения уравнения

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_{\text{ex}}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + G |B(z, t)|^2 \right) B(z, t) = \varepsilon U(z) B(z, t). \quad (5.42)$$

Такое уравнение соответствует задаче, в которой нелинейность обусловлена самовоздействием поля B или его взаимодействием с другим безынерционным полем, например, в плазме без учета инерции ионов. В этом случае можно показать, что функция $f(k)$, входящая в уравнение (5.19), имеет вид

$$f(k) = -\frac{2q}{\hbar} \int |B_0(z, t)|^2 U(z) \text{th}[q(z - \zeta)] dz,$$

и уравнение для движения максимума огибающей сводится к уравнению

$$m_{\text{ex}} \frac{d^2 \zeta}{dt^2} = F(\zeta), \quad (5.43)$$

где $F(\zeta)$ определено выражением (5.41), а масса m_{ex} совпадает с массой, непосредственно входящей в уравнение (5.42).

г) Движение солитонов в молекулярных цепях при наличии теплового движения

Во всех предыдущих разделах этого обзора предполагалось, что молекулярная цепь находится при температуре абсолютного нуля, поэтому рассматривалось только вынужденное смещение равновесных положений молекул. Интересно выяснить влияние теплового движения молекул на свойства солитонов. Ниже излагаются результаты, полученные в работе ⁶⁹.

Предположим, что в цепочке имеется достаточно большое число N молекул; следовательно, можно пренебречь краевыми эффектами.

В тепловом движении участвуют фононы со всеми N возможными значениями волнового числа q , удовлетворяющими неравенству

$$-\frac{\pi}{a} < q \leq \frac{\pi}{a}. \quad (5.44)$$

Поэтому входящие в операторы (2.3) и (2.4) смещения u_n равновесных положений молекул следует выразить через операторы рождения b_q^+ и аннигиляции b_q фононов с волновыми числами q ,

$$u_n = \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\Omega_q}} (b_q + b_{-q}^+) \exp(iqna), \quad (5.45)$$

где частота фононов

$$\Omega_q \equiv 2 \sqrt{\kappa/M} \sin\left(\frac{1}{2}|q|a\right) \approx |q|V_0, \quad (5.45a)$$

V_0 — скорость продольного звука в цепочке.

В этом случае оператор энергии акустических фононов определяется выражением

$$H_{\text{ph}} = \sum_q \hbar \Omega_q b_q^+ b_q, \quad (5.46)$$

а оператор взаимодействия смещений с внутримолекулярными возбуждениями (2.4) преобразуется к виду

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n, q} F(q) B_n^+ B_n \exp(ikna) (b_q + b_{-q}^+), \quad (5.47)$$

$$F(q) = i\sigma \sqrt{\frac{\hbar |q|}{2MV_0}} \frac{q}{|q|}, \quad \sigma = 2\chi a. \quad (5.48)$$

Коллективные состояния цепочки будем определять функцией

$$\psi_v(t) = \sum_n \varphi_n(t) B_n^+ |0\rangle U_n(t) |v\rangle, \quad (5.49)$$

где

$$|v\rangle \equiv |\{v_q\}\rangle = \prod_q |v_q\rangle, \quad |v_q\rangle = [v_q!]^{-1/2} (b_q^+)^{v_q} |0\rangle \quad (5.50)$$

— функция фононов;

$$U_n(t) = \exp \sum_q [\tilde{\beta}_{qn}(t) b_q - \tilde{\beta}_{qn}^*(t) b_q^+] \quad (5.51)$$

— унитарный оператор смещений равновесных положений пептидных групп, в котором неизвестные функции выбираются в виде модулированных плоских волн

$$\tilde{\beta}_{qn}(t) = \beta_{qn}(t) \exp(iqna). \quad (5.52)$$

Квадраты модулей неизвестных волновых функций $\varphi_n(t)$ характеризуют вероятность распределения внутримолекулярного возбуждения. Они удовлетворяют условию нормировки

$$\sum_n |\varphi_n(t)|^2 = 1. \quad (5.53)$$

Вычислим неизвестные функции $\varphi_n(t)$ и $\beta_{qn}(t)$, характеризующие возбужденные состояния цепочки, находящейся в тепловом равновесии с термостатом, имеющим температуру T . Для этого образуем функцию

$$\mathcal{H} = \sum_{\{v_q\}} \rho_{vv} H_{vv}, \quad (5.54)$$

где

$$\rho_{vv} = \frac{\langle v | \exp(-H_{\text{ph}}/\Theta) | v \rangle}{\sum_{\{v_q\}} \langle \{v_q\} | \exp(-H_{\text{ph}}/\Theta) | \{v_q\} \rangle} \quad (5.54a)$$

— диагональные элементы матрицы плотности фононных состояний, $\Theta = kT$;

$$\begin{aligned} H_{vv} = \sum_n \left[\left(\mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2}{m_{\text{ex}} a^2} \right) \varphi_n^* \varphi_n - \frac{\hbar^2 e^{-W_n}}{2m_{\text{ex}} a^2} \times \right. \\ \left. \times \varphi_n^* (\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1}) - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q F(q) |\varphi_n|^2 (\beta_{qn}^* + \beta_{q, n}) \right] + \\ + \sum_{n, q} \hbar \Omega_q (|\beta_{qn}|^2 + v_q); \quad (5.54b) \end{aligned}$$

здесь \mathcal{E}_0 — энергия дна энергетической зоны свободных экситонов, m_{ex} — их эффективная масса.

Статистическое усреднение (5.54) оператора $H_{\nu\nu}$ сводится к замене ν на среднее значение

$$\bar{\nu}_q = \left[\exp \left(\frac{\hbar \Omega_q}{\Theta} \right) - 1 \right]^{-1}$$

и замене функции W_n функцией

$$\bar{W}_n = \frac{1}{2} a^2 \sum_q q^2 (2\bar{\nu}_q + 1) |\beta_{qn}|^2. \quad (5.55)$$

Теперь с помощью функции (5.54) можно определить уравнения движения

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_n}{\partial t} = \left(\mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2}{m_{\text{ex}} a^2} \right) \varphi_n - \frac{\hbar^2 e^{-\bar{W}_n}}{2m_{\text{ex}} a^2} (\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1}) - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q F(q) \varphi_n [\beta_{qn}^*(t) + \beta_{-q,n}(t)], \quad (5.56)$$

$$\hbar V \bar{N} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \Omega_q - \frac{\hbar q^2 e^{-\bar{W}_n}}{4m_{\text{ex}}} |\varphi_n|^2 \right) \beta_{qn} = F(q) |\varphi_n|^2. \quad (5.57)$$

В качестве граничного условия примем циклические условия. Вследствие трансляционной симметрии системы наряду с энергией и полным импульсом сохраняется скорость V . Чтобы учесть трансляционную симметрию с самого начала, выберем неизвестные функции $\beta_{qn}(t)$ в виде

$$\beta_{qn}(t) = \beta_{qn}(0) \exp(-iqVt). \quad (5.58)$$

Тогда из (5.57) следует

$$\beta_{qn}(t) = - \frac{F(q) |\varphi_n|^2}{|q| \hbar V_0 \sqrt{N} (1 + |q| \alpha_n + s)}. \quad (5.59)$$

При написании (5.59) использованы сокращенные обозначения

$$s = \frac{V}{V_0}, \quad \alpha_n \equiv \frac{\hbar |\varphi_n|^2 \exp(-\bar{W}_n)}{4m_{\text{ex}} V_0}. \quad (5.60)$$

В области, где $|\varphi_n|^2 \neq 0$, происходит изменение равновесных расстояний между соседними молекулами на величину δ_n , определяемую функцией

$$\delta_n(t) \equiv \langle 0 | U_n^+(t) (u_n - u_{n-1}) U_n(t) | 0 \rangle = - \frac{a\sigma |\varphi_n(t)|^2}{MNV_0^2} \sum_q \frac{1 + |q| \alpha_n}{(1 + |q| \alpha_n)^2 - s^2}. \quad (5.61)$$

Подставив значение (5.58) в (5.56), получим нелинейное уравнение

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{E} - \frac{\hbar^2}{m_{\text{ex}} a^2} \right) \varphi_n + G_n |\varphi_n|^2 \varphi_n + \frac{\hbar^2 \exp(-\bar{W}_n)}{2m_{\text{ex}} a^2} (\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1}) = 0, \quad (5.62)$$

в котором величина

$$G_n \equiv \frac{\sigma^2}{MV_0^2 N} \sum_q \frac{1 + |q| \alpha_n}{(1 + |q| \alpha_n)^2 - s^2}, \quad (5.63)$$

в свою очередь, сложным образом зависит от $\varphi_n(t)$. Входящие в (5.61) и (5.63) суммы по q можно заменить интегралами в соответствии с равенством

$$\frac{1}{N} \sum_q f(|q|) = \frac{1}{q_0} \int_0^{q_0} f(q) dq, \quad q_0 = \frac{\pi}{2a};$$

тогда

$$\frac{1}{N} \sum_q \frac{1 + |q| \alpha_n}{(1 + |q| \alpha_n)^2 - s^2} = \frac{1}{q_0 \alpha_n} \ln \left[1 + \frac{q_0 \alpha_n (2 + q_0 \alpha_n)}{1 - s^2} \right]. \quad (5.63')$$

Далее будем предполагать, что выполняется неравенство

$$q_0 \alpha_n \ll 1. \quad (5.64)$$

В этом случае, при учете (5.63'), выражения (5.61) и (5.63) принимают более простой вид

$$\delta_n(t) \approx - \frac{a\sigma |\varphi_n|^2}{MV_0^2(1-s^2)}, \quad (5.65)$$

$$G_n \approx \frac{\sigma^2}{MV_0^2(1-s^2)}. \quad (5.66)$$

В том же приближении выражение (5.55) принимает вид

$$\overline{W}_n = |\varphi_n|^4 B f(\Theta), \quad (5.67)$$

где

$$B \equiv \frac{a^2 q_0 \sigma^2}{4M\hbar V_0^2(1-s^2)} \ll 1. \quad (5.67a)$$

$$f(\Theta) \equiv \frac{1}{q_0^2} \int_0^{q_0} q(1 + \bar{v}_q) dq = \begin{cases} \frac{1}{2} + \frac{2\Theta}{\hbar\Omega_0}, & \text{если } \hbar\Omega_0 \ll \Theta, \\ \frac{1}{2} + \frac{\pi^2\Theta^2}{6\hbar^2\Omega_0^2}, & \text{если } \hbar\Omega_0 \gg \Theta. \end{cases} \quad (5.67b)$$

при $\Omega_0 = q_0 V_0$.

Энергия фононов (без учета нулевой энергии), входящая в выражение (5.54б), преобразуется к виду:

$$E_{ph} \equiv \sum_{n,q} \hbar\Omega_q (\bar{v}_q + |\beta_{qn}|^2) = N\hbar\Omega_0 [f(\Theta(-)1/2)] + \frac{\sigma^2 \sum |\varphi_n|^4}{2MV_0^2(1-s^2)}. \quad (5.68)$$

В этом выражении первое слагаемое определяет энергию реальных фононов, а второе — энергию деформации цепочки (виртуальные фононы).

Нелинейное уравнение (5.62) в континуальном приближении сводится к уравнению

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{E}_0 - \frac{\hbar^2(1-e^{-\overline{W}})}{a^2 m_{ex}} + \frac{\hbar^2 e^{-\overline{W}}}{2m_{ex}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + G|\varphi(z, t)|^2 \right) \varphi(z, t) = 0 \quad (5.69)$$

с условием нормировки

$$\frac{1}{a} \int |\varphi(z, t)|^2 dz = 1. \quad (5.70)$$

Уравнение (5.70) является еще слишком сложным, так как функция \overline{W} , согласно (5.67), зависит от $|\varphi(z, t)|^4$. Упрощение уравнения (5.69) возможно вследствие малого значения B и выполнения неравенства $|\varphi(z, t)|^4 < 1$. Введем число g , равное среднему значению функции $|\varphi(z, t)|^2$ в области, где она существенно отлична от нуля. Это число мы далее определим из условия согласования с полученным ниже решением. Тогда в уравнении (5.64) можно провести замену

$$(1 - e^{-\overline{W}}) \varphi(z, t) \approx {}_i g |\varphi(z, t)|^2 B f(\Theta) \varphi(z, t), \quad (5.71a)$$

и, учитывая плавность функции $\varphi(z, t)$, в следующем слагаемом уравнения (5.69) можно использовать более грубое приближение

$$\exp(-\overline{W}) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} \approx \exp[-g^2 B f(\Theta)] \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2}. \quad (5.71b)$$

С этими упрощениями уравнение (5.69) сводится к нелинейному уравнению Шрёдингера

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2}{2m_{\text{ex}}(\Theta)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + G(\Theta) |\varphi(z, t)|^2 \right) \varphi(z, t) = 0, \quad (5.72)$$

в котором от температуры зависят параметры

$$G(\Theta) = G - \frac{g\hbar^2 B f(\Theta)}{m_{\text{ex}} a^2}, \quad (5.73)$$

$$m_{\text{ex}}(\Theta) = m_{\text{ex}} \exp[g^2 B f(\Theta)]. \quad (5.74)$$

Решая уравнение (5.72), находим, что вероятность распределения возбуждения по цепи определяется функцией

$$|\varphi(z, t)|^2 = \frac{aQ(\Theta)}{2\text{ch}^2 [Q(\Theta)(z - z_0 - Vt)]}, \quad (5.75)$$

где

$$Q(\Theta) = \frac{am_{\text{ex}}(\Theta) G(\Theta)}{2\hbar^2}. \quad (5.76)$$

Среднее значение (5.75) в интервале $\Delta z = \pi/Q(\Theta)$ равно

$$g \approx \frac{aQ(\Theta)}{\pi} = \frac{a^2 m_{\text{ex}}(\Theta) G(\Theta)}{2\pi\hbar^2}.$$

Подставив это значение в (5.73) и (5.74), получим явные значения

$$G(\Theta) = \frac{\sigma^2}{MV_0^2 [1 + f(\Theta) (Bm_{\text{ex}}(\Theta)/m_{\text{ex}})]}, \quad (5.77)$$

$$m_{\text{ex}}(\Theta) = m_{\text{ex}} \exp \left[\frac{m_{\text{ex}} a^2 G(\Theta)}{2\hbar^2} \right]. \quad (5.78)$$

Уменьшение при возрастании температуры параметра нелинейности (5.77) уравнения (5.72) связано с эффективным уменьшением связи экситонов с деформацией цепи. Увеличение массы экситона (5.78) обусловлено эффективным уменьшением резонансного взаимодействия между молекулами, вызываемым нарушением фазовой когерентности из-за теплового движения.

Переходя в (5.65) к континуальному приближению и используя (5.75), найдем функцию, характеризующую изменение равновесных расстояний между соседними молекулами

$$\delta(z, t) = - \frac{a^2 Q(\Theta) \sigma}{2MV_0^2 \text{ch}^2 [Q(\Theta)(z - z_0 - Vt)]}. \quad (5.79)$$

Используя те же приближения, из (5.68) находим энергию деформации цепочки

$$E_{\text{def}} = \frac{a^2 \sigma^2 m_{\text{ex}}(\Theta) G(\Theta)}{6V_0^2 M \hbar^2 (1 - s^2)}. \quad (5.80)$$

Энергия солитона, движущегося в цепочке с постоянной скоростью V , включающая энергию деформации (5.80), определяется выражением

$$E_{\text{sol}}(V) = \mathcal{E} + \frac{1}{2} m_{\text{ex}}(\Theta) V^2 - \frac{a^2 \sigma^4 m_{\text{ex}}(\Theta)}{24\hbar^2 M^2 V_0^2 (1 - s^2)^2 \Xi(\Theta)}, \quad (5.81)$$

где

$$\Xi(\Theta) = 1 + \frac{m_{\text{ex}}(\Theta) f(\Theta) B}{2\pi m_{\text{ex}}} \approx 1.$$

При малых скоростях экситона $s^2 \ll 1$ из (5.81) следует приближенное выражение

$$E_{\text{sol}}(V) = E_{\text{sol}}(0) + \frac{1}{2} m_{\text{sol}}(\Theta) V^2, \quad (5.82)$$

где

$$E_{\text{sol}}(0) = \mathcal{E}_0 - \frac{a^2 \sigma^2 m_{\text{ex}}(\Theta)}{24 M^2 V_0^4 \hbar^2 \Xi(\Theta)} \quad (5.83)$$

— энергия покоящегося солитона,

$$m_{\text{sol}}(\Theta) = \frac{a^2 \sigma^2 m(\Theta)}{6 M^2 V_0^3 \hbar^2 \Xi(\Theta)}$$

— его эффективная масса.

6. ВОЗБУЖДЕНИЕ СОЛИТОНОВ В ОДНОМЕРНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СИСТЕМЕ ⁴⁹

а) Метод обратной задачи рассеяния

Нелинейное уравнение Шрёдингера (НУШ) (2.29), характеризующее стационарные состояния, перемещающиеся с постоянной скоростью V , в безразмерных единицах

$$\tau = \tilde{J}t/\hbar, \quad x = \zeta/a, \quad g = G/2\tilde{J}, \quad \tilde{J} = \hbar^2/2m_{\text{ex}}a^2 \quad (6.1)$$

можно преобразовать к стандартному виду

$$\left(i \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2g |\Psi|^2 \right) \Psi(x, \tau) = 0, \quad \int |\Psi|^2 dx = 1, \quad (6.2)$$

Это уравнение при любом положительном, не равном нулю значении g имеет частное решение вида

$$\Psi(x, \tau) = \frac{V \bar{g} \exp[i(2kx - \omega\tau)]}{2 \operatorname{ch} \left[\frac{1}{2} g(x - 4k\tau) \right]} \quad (6.3)$$

при значениях

$$\omega = 4k^2 - g^2/4, \quad 2k = m_{\text{ex}} a V / \hbar. \quad (6.4)$$

Представляет интерес исследовать обусловленное уравнением (6.2) изменение с течением времени возбуждения, описываемого в начальный момент произвольной функцией $\Psi(x, 0)$. Это исследование удобно выполнить методом обратной задачи рассеяния, который применительно к НУШ был впервые развит Захаровым и Шабатом ⁹.

Они показали, что НУШ с начальным состоянием, соответствующим произвольной быстро убывающей на бесконечности функции $\Psi(x, 0)$, можно сопоставить линейную задачу рассеяния для собственных векторов

$$v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}, \quad (6.5)$$

удовлетворяющих системе уравнений

$$\begin{aligned} v_1' - i\zeta v_1 &= q(x) v_2, & q(x) &= i V \bar{g} \Psi(x, 0), \\ v_2' - i\zeta v_2 &= -q^*(x) v_1 \end{aligned} \quad (6.6)$$

с собственными значениями $\zeta = \xi + i\eta$. Здесь и далее штрих при функциях обозначает дифференцирование по x . Система уравнений (6.6) может быть записана также в виде

$$v_1'' - q'v_1'/q + v_1(\xi^2 + |q|^2 - i\xi q'/q) = 0, \quad (6.7)$$

$$v_2 = (v_1' + i\xi v_1)/q. \quad (6.7a)$$

Согласно методу ОЗР в качестве первого шага надо найти решения системы (6.6), обладающие при фиксированной функции $q(x)$ и вещественном $\zeta = \xi$ следующим асимптотическим поведением:

$$\lim v(\xi, x) = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp(-i\xi x), & \text{если } x \rightarrow -\infty, \\ a(\xi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp(-i\xi x) + b(\xi) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \exp(i\xi x), & x \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (6.8)$$

Комплексные коэффициенты $a(\xi)$ и $b(\xi)$ удовлетворяют равенству

$$|a(\xi)|^2 + |b(\xi)|^2 = 1. \quad (6.9)$$

Величина, обратная $a(\xi)$, определяет коэффициент прохождения плоской волны, падающей на потенциал $q(x)$ из области $x \sim \infty$, а отношение

$$R(\xi) = b(\xi)/a(\xi) \quad (6.10)$$

— ее коэффициент отражения.

Функции (6.8) допускают аналитическое продолжение в верхнюю полуплоскость ($\eta > 0$) комплексной переменной ζ . В методе ОЗР (см. ⁹⁻¹³) доказывается, что из $a(\zeta)$ и $b(\zeta)$, найденных для времени $\tau = 0$, можно получить их значения при $\tau \neq 0$, используя равенства

$$a(\zeta, \tau) = a(\zeta), \quad b(\zeta, \tau) = b(\zeta) \exp(4i\zeta^2\tau). \quad (6.11)$$

Если коэффициенты $a(\zeta_j)$ обращаются в нуль в верхней полуплоскости комплексного ζ , то при этих значениях ζ_j асимптотическое поведение функций $v(\zeta_j, x)$ определяется выражениями

$$v(\zeta_j, x) = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{\eta_j x} \exp(-i\xi_j x), & x \rightarrow -\infty, \quad j=1, \dots, N, \\ b(\zeta_j) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-\eta_j x} \exp(i\xi_j x), & x \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (6.12)$$

Следовательно, функция (6.12) при $\eta_j \neq 0$ асимптотически убывает при $|x| \rightarrow \infty$ и описывает связанные состояния, соответствующие комплексным собственным значениям ζ_j уравнений (6.6).

Набор значений

$$\zeta_j, \quad C_j(\tau) = b(\zeta_j, x) \left[\frac{\partial a(\zeta)}{\partial \zeta} \right]_{\zeta=\zeta_j}^{-1}, \quad j=1, 2, \dots, N, \quad (6.13)$$

$$R(\xi, \tau) = b(\xi, \tau)/a(\xi)$$

образует совокупность так называемых «данных рассеяния». С помощью этих данных можно определить вспомогательную функцию

$$F(x, \tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi R(\xi, \tau) e^{i\xi x} + \sum_{j=1}^N C_j(\tau) \exp(i\zeta_j x), \quad (6.14)$$

которая входит в интегральное уравнение Гельфанда — Левитана — Марченко

$$K(x, y) = F^*(x+y, \tau) - \int_x^{\infty} ds \int_x^{\infty} dz F^*(s+y, \tau) F(s+z, \tau) K(x, z). \quad (6.15)$$

Через решение этого уравнения с помощью равенства

$$q(x, \tau) = -2K(x, x) \quad (6.16)$$

выражается искомая функция $q(x, \tau)$ и волновая функция

$$\Psi(x, \tau) = -iq(x, \tau)/\sqrt{g}, \quad (6.17)$$

удовлетворяющая (6.2) при начальном значении $\Psi(x, 0)$. В качестве иллюстрации применения метода ОЗР ниже, следуя работе Брижик и автора ⁴⁹, рассматриваются специальные случаи начальных условий.

б) Начальный импульс задан в виде гиперболического секанса

Предположим, что при $\tau = 0$ начальный импульс задается в виде

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{2} \sqrt{g} e^{2ikh} \operatorname{sech}(gx/2), \quad 2k = m_{\text{ох}} aV/\hbar. \quad (6.18)$$

Для вычисления данных рассеяния достаточно найти асимптотические решения уравнений (6.7) при значении

$$q(x, 0) = i\sqrt{g}\Psi(x, 0) = \frac{ig}{2} e^{2ikh} \operatorname{sech}(gx/2). \quad (6.19)$$

Если $|x| \rightarrow \infty$, то уравнение (6.7) переходит в уравнение

$$v_1'' - (2ik \pm g/2)v_1' + \zeta(\zeta - k \mp ig/2)v_1 = 0. \quad (6.20)$$

Верхний знак в (6.20) соответствует $x \rightarrow -\infty$, нижний — случаю $x \rightarrow \infty$. Это уравнение имеет решение

$$v_1 \rightarrow \begin{cases} \exp\{[i(k+m_1) + g/4]x\}, & x \rightarrow -\infty, \\ \exp\{[i(k-m_2) - g/4]x\}, & x \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (6.21)$$

где

$$m_1 = \zeta + k - ig/4, \quad m_2 = \zeta + k + ig/4. \quad (6.22)$$

При $g \neq 0$ функции (6.21) совпадают с асимптотическими функциями (6.8) при значении

$$\zeta_1 \equiv \xi_1 + i\eta_1, \quad \xi_1 = -k, \quad \eta_1 = g/4. \quad (6.23)$$

Из (6.8) при $x \rightarrow \infty$ следует $v_2(\xi) = b(\xi) e^{i\xi x}$. С другой стороны, при значениях (6.21) из уравнения (6.7а) следует, что функция $v_2(\infty) = 0$. Таким образом, при потенциале (6.19) множитель $b(\xi)$ и коэффициент отражения $R(\xi)$ равны нулю. Такие потенциалы называются безотражательными, их нельзя обнаружить по рассеянию плоских волн, приходящих из бесконечности.

Итак, в нашей задаче спектральные данные (6.13) имеют значения

$$\begin{aligned} R(\xi, \tau) &= 0, \quad \zeta_1 = -k + ig/4, \\ C_1(\tau) &= C_0 \exp(4i\zeta_1^* \tau), \quad C_0 \equiv ig/2. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Поэтому функция (6.14) имеет простой вид

$$F(x, \tau) = C_1(\tau) \exp(i\zeta_1 x). \quad (6.25)$$

Подставив это выражение в уравнение (6.15) и полагая

$$K(x, y) = f(x) \exp(-i\zeta_1^* y),$$

находим

$$f(x) = C_1^*(\tau) e^{-i\zeta_1^* x} \left[1 + \frac{4|C_1(\tau)|^2}{g^2} \exp(-gx) \right]^{-1}.$$

Таким образом, квадрат модуля волновой функции в соответствии с точным решением (6.3) к моменту времени τ при учете (6.16) и (6.17) будет определяться выражением

$$|\Psi(x, \tau)|^2 = \frac{1}{g} |q(x, \tau)|^2 = \frac{g/4}{\text{ch}^2 [g(x-x_0-4k\tau)/2]}, \quad (6.26)$$

где

$$x_0 = \frac{2}{g} \ln(2|C_0|/g) = 0.$$

Итак, начальный импульс (6.18) распространяется с течением времени со скоростью V в виде одиночного солитона при любом не равном нулю значении g .

в) Начальный импульс задан в виде прямоугольной ступеньки

Предположим, что в момент времени $\tau = 0$ импульс задан в виде

$$\Psi_{(x, 0)} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{l}} \exp(2ikx), & \text{если } 0 \leq x \leq l, \\ 0, & \text{если } x < 0 \text{ и } x > l. \end{cases} \quad (6.27)$$

В этом случае решение системы уравнения (6.6) можно искать в виде

$$v = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp(-i\zeta x) \text{ при } x < 0, \\ v = a(\zeta) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\zeta x} + b(\zeta) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\zeta x} \text{ при } x > l,$$

а в области $0 \leq x \leq l$

$$v_1 = \{A_1 \sin mx + A_2 \cos mx\} e^{ihx}, \\ v_2 = \frac{1}{Q_0} \{[(\zeta + k) A_1 + im A_2] \sin mx + [(\zeta + k) A_2 - im A_1] \sin mx\} e^{-ihx},$$

где

$$Q_0 \equiv \sqrt{g/l}, \quad m^2 \equiv Q_0^2 + (\zeta + k)^2. \quad (6.28)$$

Из условия непрерывности решений следует

$$A_1(\zeta) = -i(k + \zeta)/m, \quad A_2 = 1, \quad (6.29) \\ a(\zeta) = m^{-1} S(\zeta, k) e^{i(k+\zeta)l}, \quad b(\zeta) = im^{-1} Q_0 e^{-i(k+\zeta)l},$$

где

$$S(\zeta, k) = m \cos ml - i(k + \zeta) \sin ml. \quad (6.30)$$

Используя (6.29), находим коэффициент отражения в момент времени

$$R(\xi) = iQ_0 S^{-1}(\xi, k) \exp[-2i(k + \xi)l].$$

К моменту времени τ , согласно (6.11), он примет значение

$$R(\xi, \tau) = R(\xi) \exp(4i\xi^2\tau). \quad (6.31)$$

Параметры связанных состояний определяются из условия

$$S(\zeta, k) = 0.$$

Это уравнение имеет решение

$$\zeta_0 = -k + i\eta_0, \quad (6.32)$$

в котором η_0 определяется трансцендентным уравнением

$$l\eta_0 = -\sqrt{gl - l^2\eta_0^2} \text{ctg} \sqrt{gl - \eta_0^2 l^2}. \quad (6.33)$$

При значениях \sqrt{gl} , меньших $\pi/2$, это уравнение не имеет отличных от нуля решений. В этом случае начальный импульс (6.27) не порождает солитоны, а, осциллируя, размывается по цепочке с плотностью вероятности, убывающей с течением времени по закону $1/\sqrt{\tau}$.

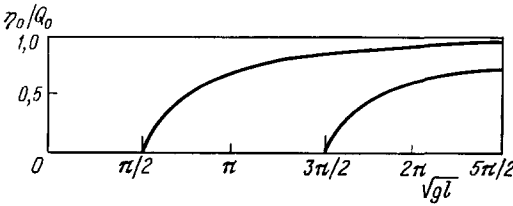


Рис. 12. Зависимость отношения η_0/Q_0 от величины \sqrt{gl} .

Если выполняется неравенство $\pi/2 < \sqrt{gl} \leq 3\pi/2$, то уравнение (6.33) удовлетворяется одним положительным значением $\eta_0 \leq Q_0$. При выполнении неравенства $3\pi/2 < \sqrt{gl} \leq 5\pi/2$ уравнение (6.33) имеет два корня. На рис. 12 указана зависимость отношения η_0/Q_0 от величины \sqrt{gl} . При $\eta_0 \neq 0$, согласно (6.11), (6.13) и (6.28),

$$C_0(\tau) = \alpha \exp(4i\xi_0^2\tau), \tag{6.35}$$

$$\alpha \equiv \frac{m_1^2 \exp(2l\eta_0)}{Q_0(m_1 l \cos m_1 l - \sin m_1 l)}, \quad m_1^2 \equiv Q_0^2 - \eta_0^2. \tag{6.36}$$

Итак, функция (6.14) принимает значение

$$F(x, \tau) = C_0(\tau) e^{i\xi_0\tau} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} R(\xi, \tau) e^{i\xi x} dx, \tag{6.37}$$

где $C_0(\tau)$ и $R(\xi, \tau)$ определены соответственно выражениями (6.35) и (6.31). Первое слагаемое в (6.37) определяет солитонное решение, а второе слагаемое — «хвост», сопровождающий солитон.

При больших временах τ значение интеграла можно аппроксимировать выражением

$$\frac{1}{2\pi} \int R(\xi, \tau) e^{i\xi x} d\xi \approx \frac{i\sqrt{g} \exp\left\{-i\left[\frac{(x-2l)^2}{16\tau} + 2\left(kl - \frac{\pi}{8}\right)\right]\right\}}{4\sqrt{\tau} \pi l S(0, k)}. \tag{6.38}$$

Таким образом, при больших временах амплитуда «хвоста» убывает со временем по закону $1/\sqrt{\tau}$.

Сохраняя при больших временах в (6.37) только первое слагаемое и решая уравнение (6.15), определим значение $K(x, y)$ и волновую функцию

$$\Psi_s(x, \tau) = \frac{2i\eta_0 \exp\{2i[kx - 2(k^2 - \eta_0^2)\tau]\}}{\sqrt{g} \operatorname{ch} z}, \tag{6.39}$$

где

$$z = 2\eta_0(x - x_0 - 4k\tau), \quad x_0 = \frac{1}{2\eta_0} \ln \frac{|\alpha|}{2\eta_0}. \tag{6.40}$$

Итак, при начальном возбуждении в виде импульса (6.27) солитонные решения появляются при параметре нелинейности g , превышающем критическое значение

$$g_{кр} = \pi^2/4l. \tag{6.41}$$

Амплитуда солитона увеличивается, а его ширина уменьшается по мере увеличения g . При $g = \pi^2/4l$ основной вклад в нормировку волновой

функции определяется солитоном, так как

$$\int |\Psi_s(x, \tau)|^2 dx \approx 0,85.$$

Роль «хвоста» при этом пренебрежимо мала.

В безынерционном приближении, т. е. когда параметр нелинейности g не зависит от скорости солитона V , возбуждению, описываемому уравнением (6.2), соответствует в единицах $\hbar^2/2ma^2$ энергия

$$E_0(v) = \int \left(\left| \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right|^2 - g_0 |\Psi|^4 \right) dx.$$

Если параметр нелинейности $g = \frac{g_0}{(1-s^2)}$ зависит от скорости, то проявляется инерционность смещений пептидных групп. В этом случае интеграл энергии, включающей деформацию цепи, определяется выражением

$$E(v) = \int \left(\left| \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right|^2 - g(1-2s^2) |\Psi|^4 \right) dx. \quad (6.42)$$

В начальном состоянии эта энергия определяется двумя слагаемыми:

$$E(v) = E(0) + E_k, \quad (6.43)$$

где

$$E(0) = -g_0/l,$$

$$E_k = 4k^2(1 + \beta g/l), \quad \beta \equiv \hbar^2/m^2 a^2 V_0^2. \quad (6.44)$$

При $k = 0$ энергия (6.43) меньше дна экситонной зоны на величину $E(0)$.

При $\tau > 0$ часть энергии (6.43) переносится «хвостом», а оставшаяся часть

$$E_s(V) = E_s(0) + E_{s,k}, \quad (6.45)$$

где

$$E_s(0) = -16\eta_0^3/3g_0, \quad E_{s,k} = 16\eta_0 k^2(1 + 20\eta^2\beta/3)g_0^{-1} \quad (6.46)$$

переносится солитоном. При установлении асимптотической односолитонной формы (6.39) возбуждение теряет часть своей первоначальной энергии.

Проведенные в этом разделе вычисления показывают, что наличие (или отсутствие) порога возбуждения солитонов и величина порога зависят от характера пространственного распределения начального импульса.

Институт теоретической физики
АН УССР

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Zabusky N. J., Kruskal M. D.— Phys. Rev. Lett., 1965, v. 15, p. 240.
2. Scott-Russell J.— Proc. Roy. Soc. Edinburgh, 1844, p. 319.
3. Korteweg D. J., de Vries G.— Phil. Mag., 1895, v. 39, p. 422.
4. Сагдеев Р. З. Вопросы теории плазмы и проблема управляемых термоядерных реакций.— М.: Изд-во АН СССР, 1958, т. 4, с. 384.
5. Сагдеев Р. З.— В кн. Вопросы теории плазмы.— М.: Атомиздат, 1964.— Вып. 4, с. 20.
6. Кадоццев Б. Б., Карпман В. И.— УФН, 1973, т. 109, с. 193.
7. Gardner C. S., Green J. M., Kruskal M. D., Miura R. M.— Phys. Rev., 1967, v. 19, p. 1095.
8. Захаров В. Е., Фаддеев Л. Д.— Функц. анализ и его приложение, 1971, т. 5, вып. 4, с. 18.
9. Захаров В. Е., Шабат А. Б.— Ibid., 1974, т. 8, вып. 3, с. 43.
10. Cologero F., Degasperis A.— Nuovo Cimento. Ser. B, 1976, v. 32, p. 201; 1977, v. 39, p. 1.
11. Дубровин В. А., Матвеев В. Б., Новиков С. П.— УМН, 1976, т. 31, вып. 1, с. 55.

12. Марченко В. А. Операторы Штурма — Лиувилля и их приложения.— Киев: Наукова думка, 1977.
13. Захаров В. Е., Манаков С. В., Новиков С. П., Пятаевский Л. П.— Теория солитонов. Метод обратной задачи.— М.: Наука, 1980.— С. 320.
14. Scott A. C., Chu F. Y. F., McLaughlin D. W.— Proc. IEEE, 1973, v. 61, p. 1443.
15. Рашба Э. И.— Опт. и спектр., 1957, т. 2, с. 75.
16. Рашба Э. И.— Ibid., с. 88.
17. Toyazawa Y.— Progr. Theor. Phys., 1961, v. 26, p. 29; Techn. Report ISSP (Japan) Ser. A, 1974, No. 648.
18. Федянин В. К., Якушевич Л. В.— ТМФ, 1977, т. 30, с. 133.
19. Давыдов А. С., Ницович Б. М.— ФТТ, 1967, т. 9, с. 2230.
20. Davydov A. S.— Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1973, v. 59, p. 465.
21. Боголюбов Н. Н.— УМЖ, 1950, т. 2, с. 3.
22. Тябликов С. В.— ЖЭТФ, 1951, т. 21, с. 377.
23. Воловик Г. Е., Эдельштейн В. М.— ЖЭТФ, 1973, т. 65, с. 1946.
24. Мельников В. М. Ibid., 1977, т. 72, с. 2345.
25. Давыдов А. С., Кислуха Н. И.— Ibid., 1976, т. 71, с. 1090.
26. Давыдов А. С., Еремко А. А.— УФЖ, 1977, т. 22, с. 881.
27. Davydov A. S.— Phys. Scripta, 1979, v. 20, p. 387.
28. Еремко А. А., Сергиенко А. И.— Препринт ИТФ АН УССР 80-90Р.— Киев, 1980.
29. Клаудер Дж., Сударшан Э. Основы квантовой оптики.— М.: Мир, 1970.— С. 428.
30. Когерентные состояния в квантовой теории.— М.: Мир, 1972.— С. 232.
31. Green D. E.— Science, 1973, v. 181, p. 583.
32. Ann. N.Y. Acad. Sci., 1974, v. 227 General discussion, pp. 108—115.
33. Davydov A. S.— J. Theor. Biol., 1977, v. 66, p. 379.
34. Давыдов А. С. В кн. Методологические и теоретические проблемы в биофизике.— М.: Наука, 1979.— С. 243.
35. Davydov A. S.— Intern. J. Quant. Chem., 1979, v. 26, p. 5.
36. Волькенштейн М. В. Молекулярная биофизика.— М. Наука, 1975.— С. 616.
37. Давыдов А. С. Биология и квантовая механика.— Киев. Наукова думка, 1979.
38. Pauling L., Corey R. B., Hayward R.— Sci. American, February, 1954, v. 191, p. 51.
39. Nevskaya N. A., Chirgadze Yu. N.— Biopolymers, 1976, v. 15, p. 637.
40. Еремко А. А., Сергеевко А. И.— Препринт ИТФ АН УССР N80-IP.— Киев, 1980.
41. Давыдов А. С., Еремко А. А., Сергеевко А. И.— УФЖ, 1978, т. 23, с. 983.
42. Давыдов А. С., Супрун А. Д.— УФЖ, 1974, т. 19, с. 44.
43. Scott A. C.— Phys. Lett. Ser. A, 1981, v. 86, p. 60.
44. Scott A. C. Dynamics of Davydov Solitons; Los-Alamos Scientific Lab. LA-UR 81-3268; Phys. Rev. Ser. B, 1982 (to appear).
45. Scott A. C. The Vibrational Structure of Davydov Solitons; Los-Alamos Sci. Lab. LA-UR 81-3714; Phys. Scripta, 1982 (to appear).
46. Webb S. J.— Phys. Rept., 1980, v. 60, p. 201.
47. Human J. M., McLaughlin D. W., Scott A. C. On Davydov's Alpha-helix Solitons.— Los-Alamos Sci. Lab., 1979; Physica. Ser. D, 1979, v. 3, p. 23.
48. Eilbeck J. C. Davydov Solitons: a 16 mm Mute Film Available from Swift Film Productions. 1 Wool Road Wimbledon, London.
49. Брижик Л. С., Давыдов А. С. Возбуждение солитонов в одномерных молекулярных системах: Препринт ИТФ АН УССР 82-11 Р. 1982.
50. Davydov A. S.— Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1980, v. 102, p. 275.
51. Del Giudice E., Doglia S., Milani M.— Phys. Scripta, 1981, v. 23, p. 307.
52. Hanson J., Huxley H. E.— Nature, 1954, v. 173, p. 973.
53. Huxley A. F., Nidgergerke R.— Ibid., p. 971.
54. Murray J. M., Weber A.— Sci. American, February, 1974, v. 230, p. 59.
55. Davydov A. S.— J. Theor. Biol., 1973, v. 38, p. 559.
56. Давыдов А. С.— Биофизика, 1974, т. 19, с. 670.
57. Давыдов А. С.— УФЖ, 1975, т. 20, с. 179.
58. Давыдов А. С.— В кн. Биофизика и биохимия мышечного сокращения.— М.: Наука, 1976.— С. 254.
59. Davydov A. S.— Studia Biophys., 1974, v. 47, p. 221.

60. Ragulskis K. M., Bansevichyus R. J., Didzgalvis R. B., Ragulskiene V. I.— Theory of Machines and Mechanisms.— М.: Nauka, 1976.
61. Ragulskis K. M. The Shock and Vibration Information Center. Naval Research Lab., Washington, 1980, v. 12, No. 2, p. 27.
62. Карпман В. И., Маслов Е. М.— ЖЭТФ, 1977, т. 73, с. 537.
63. Fogel M. B., Trullinger S. E., Bishop A. R., Krumhansl J. A.— Phys. Rev. Lett., 1976, v. 36, p. 1411.
64. Keener J. P., McLaughlin D. W.— Phys. Rev., Ser. A, 1977, v. 16, p. 777.
65. Давыдов А. С., Еремко А. А.— ТМФ, 1980, т. 43, с. 367.
66. Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний.— М.: Наука, 1974.— С. 503.
67. Ichikawa Y. H.— Phys. Scripta, 1979, v. 20, p. 296.
68. Карпман В. И.— Ibid., p. 462.
69. Давыдов А. С.— ЖЭТФ, 1980, т. 78, с. 789.