

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Солитоны в невырожденных бистабильных системах

Л.И. Маневич, А.В. Савин, В.В. Смирнов, С.Н. Волков

В статье рассматриваются солитонные элементарные возбуждения в бистабильных системах с невырожденными положениями равновесия. Обсуждаются модели конкретных физических систем, которые могут быть описаны в рамках рассматриваемого подхода единой функцией Гамильтона. Подробный анализ континуальных уравнений движения показывает существование в таких системах возбуждений солитонного типа как нетопологических, участвующих в переносе энергии, так и топологических, отвечающих за перенос состояния, т.е. описывающих переход между различными положениями равновесия. Данные компьютерного моделирования сравниваются с результатами аналитических исследований.

PACS numbers: 52.35.Sb

Содержание

1. Введение (937).
2. Солитоны в молекулярных системах с невырожденной бистабильностью (939).
2.1. Обобщенная модель бистабильной системы. 2.2. Уравнения движения. 2.3. Солитонные возбуждения невырожденной бистабильной цепи.
3. Численное моделирование динамики солитонов в бистабильной цепочке (944).
4. Заключение (951).
5. Приложение (951).
5.1. Экзотермические реакции в молекулярном двухатомном кристалле. Детонация твердых взрывчатых веществ. 5.2. Динамика локальных переходов в макромолекулах ДНК. 5.3. Топохимическая полимеризация диацетиленов. 5.4. Модель подвижности протонов в сильно поляризованной цепи водородных связей.

Список литературы (957).

Л.И. Маневич, В.В. Смирнов. Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, 117977, Москва, ул. Косыгина, 4
Тел. (095) 939-75-15
Факс (095) 137-82-84
E-mail: polycon@ecosrv.msk.su
А.В. Савин. Государственный институт физико-технических проблем, 119034, Москва, ул. Пречистенка, 13/7
Тел. (095) 248-82-30
E-mail: savin@dep11.ifftr.msk.su
С.Н. Волков. Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова АН Украины, 252143, Киев, ул. Метрологическая, 14-б
Тел. (044) 266-91-59
E-mail: qeitr@gluk.apc.org

Статья поступила 17 февраля 1994 г.

1. Введение

Развитие современной нелинейной физики привело к открытию новых элементарных механизмов, определяющих на молекулярном уровне протекание многих физических процессов в кристаллах и в других упорядоченных молекулярных системах. Сегодня вполне ясна роль нетопологических солитонов, обеспечивающих наиболее эффективный механизм переноса энергии в таких процессах как, например, теплопроводность и разрушение твердых тел [1–3] или распространения сигналов в биологических макромолекулах [4]. Прохождение подобных локализованных возбуждений не изменяет состояние системы, что связано с их нулевым топологическим зарядом. С другой стороны, солитонные возбуждения в тех бистабильных структурах, где вырожденность по энергии равновесных состояний предопределяет возможность "переноса состояния" при достаточно сильном взаимодействии между структурными элементами системы, топологический солитон (кинк или антикинк) описывает переход из одного равновесного состояния в другое, т. е. обеспечивает максимально эффективный, волновой механизм такого процесса [4, 5]. Такой механизм реализуется, например, при движении доменных стенок и дислокаций [3, 5, 6], определяя динамическую природу структурных фазовых переходов и пластического течения в кристаллах. До недавнего времени считалось очевидным, что существование топологических солитонов требует не только неединственности равновесия, но и вырожденности по энергии соответствующих равновесных состояний. Это второе условие представляется весьма естественным, так как в противном случае распространение стационарной волны должно быть связано либо с диссипацией, либо с притоком энергии (в зависимости от соотношения энергий равновесных состояний), в то время как рассматриваемые динамические модели обычно пред-

© Л.И. Маневич, А.В. Савин, В.В. Смирнов, С.Н. Волков 1994

полагают гамильтонову структуру основных уравнений и сохранение полной энергии.

В этом случае элементарными возбуждениями являются топологические солитоны (кинки), реализующие переходы между двумя эквивалентными равновесными состояниями. Такие переходы рассматривались прежде всего в однокомпонентных моделях. Если речь идет, например, о молекулярных кристаллах, то однокомпонентность модели предполагает слабое влияние внутримолекулярной подвижности на структурные изменения системы. Однако в ряде случаев, особенно при исследовании структурных переходов в самих молекулах, это влияние становится первостепенно важным и учет взаимосвязи внутри- и межмолекулярных степеней свободы, т.е. многокомпонентности, становится необходимым. В вырожденной системе учет такой взаимосвязи не приводит к появлению каких-либо новых типов солитонных решений, хотя и может вызывать изменения в спектре их скоростей (появление в спектре новой зоны [7]).

Понятно, что условие энергетической вырожденности резко сужает класс рассматриваемых процессов. В частности, должны быть исключены из рассмотрения структурные переходы в невырожденных системах, распространение детонационных волн и топохимические реакции в молекулярных кристаллах, конформационные перестройки в полимерах и биологических макромолекулах. Но в однокомпонентных невырожденных системах топологические солитоны не существуют, а нетопологические солитоны могут существовать только на фоне метастабильного состояния [8, 9]. В то же время в работах [10–12] при изучении динамики невырожденных бистабильных квазиодномерных молекулярных цепочек в рамках двухкомпонентной модели был построен более широкий класс нетопологических солитонов, чем в однокомпонентной модели [8]. Такие солитоны, описывающие локальные возмущения устойчивого состояния цепочки, могут существовать не только на фоне более высокого по энергии метастабильного состояния, как это имеет место в однокомпонентной модели, но и на фоне основного состояния. В работах [13–16] эти солитоны были использованы для описания конформационных В–А-переходов в молекулах ДНК.

Хотя существование топологических солитонов в невырожденных системах на первый взгляд представляется невозможным, численные эксперименты последних лет, выполненные прежде всего в связи с моделированием распространения детонационной волны в двухкомпонентных моделях твердых тел (в этом случае однородное состояние, соответствующее продуктам реакции, можно считать смещенным на бесконечность), выявили солитонную структуру фронта и существование выделенной скорости его распространения, несмотря на энергетическую невырожденность системы. Если в работе [17], посвященной моделированию детонации в одномерном кристалле, этот факт был связан с наличием специально введенной диссипации, то результаты работ [18, 19] относятся к более сложным по структуре, но гамильтоновым моделям. При этом упорядоченная структура прифронтовой области наглядно свидетельствовала о существовании топологических солитонов. Однако сложность рассмотренных систем не давала возможности решить про-

блему точной идентификации элементарного процесса, ответственного за "перенос состояния" в невырожденном случае. Для этого необходимо было построить более простую модель, допускающую аналитическое исследование.

Такая модель бесконечного одномерного молекулярного кристалла, предложенная в [20], позволила в явном виде выявить внутренний механизм, обеспечивающий формирование топологического солитона (кинка) и постоянство скорости фронта.

Найденный аналитически кинк описывает переход системы из начальной равновесной конфигурации в промежуточное стационарное (динамическое) состояние в области притяжения основного конечного состояния. Существование такого промежуточного состояния и есть необходимое условие формирования топологического солитона в невырожденной бистабильной системе. Найденное в явном виде решение описывает двухкомпонентный кинк, представляющий собой связанные нелинейные волны внутримолекулярной деформации и смещений центров масс молекул. После прохождения такого кинка система переходит из начальной конфигурации к промежуточному стационарному состоянию в области притяжения конечного равновесного состояния. Промежуточное состояние, а следовательно, и топологический солитон существуют в некоторой области молекулярных параметров и при единственном значении скорости волны $V = V_0$. Хотя это состояние является неравновесным (центры масс молекул имеют за фронтом ненулевые скорости), в выбранной системе отсчета, связанной с бегущей волной, оно становится неотличимым от равновесного с "потенциальной" энергией, равной энергии исходного равновесного состояния. Вырождение потенциальной энергии в двух стационарных точках и делает возможным формирование топологического солитона. Последнее означает, что класс систем, в которых может наблюдаться солитонный механизм "переноса состояния", существенно шире, чем это предполагалось ранее, а следовательно, в нелинейной физике кристаллов и других упорядоченных систем открываются принципиально новые возможности.

Цель настоящей работы — классификация солитонных возбуждений в широком классе невырожденных бистабильных систем, анализ условий их существования и устойчивости.

Следующий (второй) раздел посвящен аналитическому исследованию рассматриваемого класса систем в континуальном приближении. Прежде всего получен соответствующий континуальный гамильтониан и выписаны уравнения движения. После введения кинематической переменной уравнения интегрируются в явной форме. Найденны условия существования возможных солитонных возбуждений в бистабильных невырожденных системах. Рассмотрен механизм выделения единственной скорости волны, соответствующей топологическому солитону.

В третьем разделе представлены результаты численного исследования уравнений движения дискретной модели. Изучена динамика солитонов при начальных условиях, которые соответствуют точным решениям, полученным аналитически в континуальном приближении. Исследуется характер распространения структурного перехода при начальных условиях достаточно общего вида, описывающих локальные возбуждения

рассматриваемых систем. Особое внимание уделяется сопоставлению предсказанных и наблюдаемых характеристик элементарного возбуждения, анализу тонкой структуры и устойчивости фронта стационарной волны. Изучается роль топологического солитона в формировании стационарной волны, реализующей структурный переход на атомном уровне.

В приложении представлены некоторые примеры, относящиеся к различным областям физики. Показано, что соответствующие гамильтонианы являются частными случаями общего гамильтониана, спектр солитонных возбуждений которого исследован в разделах 2, 3.

2. Солитоны в молекулярных системах с невырожденной бистабильностью

Далее, мы будем рассматривать нелинейные решетки, в которых можно выделить две взаимодействующие степени свободы ("внешнюю" и "внутреннюю") и найти несколько (по меньшей мере, две) устойчивые равновесные конфигурации с неравными энергиями. Простейшей реализацией такой системы можно считать двухатомную решетку с чередующимися потенциалами взаимодействия ближайших соседей, один из которых является двухъямным, а второй близок к гармоническому. В этом случае естественными координатами являются взаимные смещения соседних атомов, связанных двухъямным потенциалом (внутренняя координата), и взаимное смещение центров масс таких пар (внешняя координата). Аналогичная решетка, но с учетом дальнего действия, рассмотрена в приложении (п. 5.1).

2.1. Обобщенная модель бистабильной системы

Рассмотрим класс бистабильных невырожденных систем, описываемых гамильтонианом следующего вида:

$$E = \sum_n \left[\frac{1}{2} M \dot{R}_n^2 + \frac{1}{2} m \dot{r}_n^2 + \frac{1}{2} K (R_{n+1} - R_n)^2 + \frac{1}{2} k (r_{n+1} - r_n)^2 + \Phi(r_n) + (R_{n+1} - R_n) G_+(r_n) + (R_n - R_{n-1}) G_-(r_n) \right], \quad (1)$$

который соответствует полной энергии двухкомпонентной системы бистабильных элементов с неэквивалентными положениями равновесия, схематически представленной на рис. 1. Здесь R_n и r_n — относительные смещения звеньев внешней и внутренней подрешеток (внешняя и внутренняя компоненты), M и m — массы звеньев подрешеток, K и k — их жесткости, $\Phi(r)$ — асимметричный двухъямный потенциал, который можно выбрать в виде

$$\Phi(r) = \varepsilon_0 [1 - (ru_0^{-1})^2]^2 + \varepsilon_1 ru_0^{-1} + \varepsilon_2,$$

где параметры ε_0 и ε_1 характеризуют высоту барьера и разность энергий равновесных состояний, параметр ε_2 задает уровень отсчета энергии, а u_0 характеризует ширину потенциального барьера. Функции

$$G_{\pm}(r) = X_{1,\pm}(r - u_1)u_0^{-1} + X_{2,\pm}(u_1^2 - r^2)u_0^{-2}$$

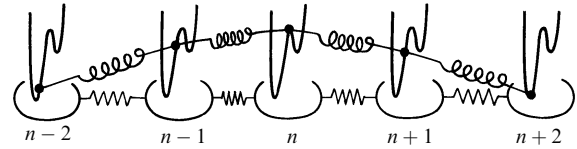


Рис. 1. Схематическое представление двухкомпонентной бистабильной системы с неэквивалентными состояниями

характеризуют взаимодействие подрешеток. Заметим, что в отличие от традиционно рассматриваемых двухмассовых решеток (см., например, [21]), параметр k , определяющий наклон оптической ветви дисперсионного соотношения, может быть как меньше, так и больше нуля, а взаимодействие подрешеток — несимметрично ($X_{i,+} \neq X_{i,-}$, $i = 1, 2$).

В более общем случае внутренняя компонента может быть связана с несколькими внешними или наоборот. Однако принципиальные особенности динамического поведения, возникающие вследствие взаимодействия компонент, могут быть выявлены уже при учете только двух компонент. В то же время, в приложении показано, что при задании соответствующих значений параметров гамильтониан (1) может описывать структурные переходы и распространение химических реакций в молекулярных кристаллах, перенос протонов по цепочкам водородных связей, динамику локальных конформационных переходов в биологических макромолекулах типа ДНК.

Введем безразмерные переменные: смещения $x_n = r_n/u_0$, $y_n = R_n/u_0$, время $\tau = t\sqrt{|k|/m}$ и энергию $H = E/|k|u_0^2$. Тогда гамильтониан системы (1) принимает вид

$$H = \sum_n \left[\frac{1}{2} \mu y_n'^2 + \frac{1}{2} x_n'^2 + \frac{1}{2} \kappa (y_{n+1} - y_n)^2 + \frac{1}{2} \delta (x_{n+1} - x_n)^2 + V(x_n) + (y_{n+1} - y_n) F_+(x_n) + (y_n - y_{n-1}) F_-(x_n) \right], \quad (2)$$

где штрих обозначает дифференцирование по безразмерному времени τ , $\mu = M/m$, $\kappa = K/|k|$, а $\delta = +1$ при $\kappa > 0$ и $\delta = -1$ при $\kappa < 0$. Безразмерный асимметричный двухъямный потенциал

$$V(x) = g_0(x^2 - 1)^2 + g_1x + g_2,$$

где $g_0 = \varepsilon_0/|k|u_0^2$, $g_1 = \varepsilon_1/|k|u_0^2$, $g_2 = \varepsilon_2/|k|u_0^2$. При $0 \leq g_1 < 8g_0/\sqrt{27}$ потенциал $V(x)$ имеет два минимума ξ_1 и ξ_3 , разделенные максимумом ξ_2 : $\xi_1 < -1 < 0 < \xi_2 < \xi_3 < 1$, где

$$\xi_1 = \frac{2}{\sqrt{3}} \cos\left(\frac{\alpha}{3} + \frac{2\pi}{3}\right), \quad \xi_2 = \frac{2}{\sqrt{3}} \cos\left(\frac{\alpha}{3} - \frac{2\pi}{3}\right), \\ \xi_3 = \frac{2}{\sqrt{3}} \cos\frac{\alpha}{3},$$

$\alpha = \arccos(-\sqrt{27}g_1/8g_0)$. Параметр $g_2 = -g_0(\xi_1^2 - 1)^2 - g_1\xi_1$ определяется из условия $V(\xi_1) = 0$. Функции $F_{\pm}(x)$ имеют вид

$$F_{\pm}(x) = \chi_{1,\pm}(x - \xi_1) + \chi_{2,\pm}(\xi_1^2 - x^2),$$

где параметры $\chi_{i,\pm} = X_{i,\pm}/|k|u_0$ ($i = 1, 2$) характеризуют взаимодействия подрешеток.

Для дальнейшего анализа динамики рассматриваемой двухкомпонентной системы определим ее устойчивые однородные состояния. Положим $x_n \equiv x$, $x'_n \equiv 0$, $y_{n+1} - y_n \equiv \rho$ и $y'_n \equiv 0$. Тогда энергия системы будет пропорциональна функции

$$f(x, \rho) = V(x) + \frac{\kappa}{2} \rho^2 + 2\rho F_s(x), \quad (3)$$

где

$$F_s(x) = \frac{1}{2} [F_+(x) + F_-(x)] = \chi_{1,s}(x - \xi_1) + \chi_{2,s}(\xi_1^2 - x^2),$$

а $\chi_{i,s} = (\chi_{i,+} + \chi_{i,-})/2$, $i = 1, 2$.

Устойчивые однородные состояния цепи соответствуют минимумам функции (3), которые определяются уравнениями равновесия

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} &= \frac{dV}{dx} + 2\rho \frac{dF_s}{dx} = 0, \\ \frac{\partial f}{\partial \rho} &= \kappa\rho + 2F_s(x) = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Из уравнения (4) имеем равенство $\rho = -2F_s(x)/\kappa$, воспользовавшись которым функцию (3) можно переписать в виде $p(x) = f(x, \rho(x)) = V(x) - 2F_s^2(x)/\kappa$. Данная функция является полиномом четвертого порядка с двукратным корнем $x = \xi_1$. Нетрудно показать, что полином третьего порядка $p'(x)$, кроме простого корня $x = \xi_1$, будет иметь еще два действительных корня $\eta_1 = -(\xi_1/2) - \sqrt{D_1}$, $\eta_2 = -(\xi_1/2) + \sqrt{D_1}$, если дискриминант $D_1 = (b_1/2)^2 - c_1 > 0$, где

$$\begin{aligned} b_1 &= 3\chi_{1,s}\chi_{2,s} \left[\kappa g_0 \left(1 - \frac{2\chi_{2,s}^2}{\kappa g_0} \right) \right]^{-1}, \\ c_1 &= \left[\xi_{1,s}^2 - 1 - \frac{\chi_{1,s}^2}{\kappa g_0} - \left(1 - \frac{2\chi_{2,s}^2}{\kappa g_0} \right) \frac{\xi_1^2}{4} - \frac{1}{2} \frac{\chi_{1,s}\chi_{2,s}\xi_1}{\kappa g_0} \right] \times \\ &\quad \times \left(1 - \frac{2\chi_{2,s}^2}{\kappa g_0} \right)^{-1}. \end{aligned}$$

Полином $p(x)$ принимает минимальные значения в двух точках ξ_1, η_2 , если коэффициент при его старшей степени $1 - (2\chi_{2,s}^2/\kappa g_0) > 0$, а корень $\eta_1 > \xi_1$.

Таким образом, при выполнении условия

$$\frac{2\chi_{2,s}^2}{\kappa g_0} < 1, \quad 0 < D_1 < \frac{9}{4} \xi_1^2, \quad (5)$$

рассматриваемая двухкомпонентная система будет иметь два устойчивых однородных состояния: более низкое по энергии **b** — $\{x_n \equiv \xi_1, y_{n+1} - y_n \equiv 0\}$ и более высокое — **e**-состояние $\{x_n \equiv \eta_2, y_{n+1} - y_n \equiv \rho_e\}$, где $\rho_e = -2F_s(\eta_2)/\kappa < 0$. При снятии асимметрии двухъямного потенциала ($g_1 = 0$ и $\chi_{1,s} = 0$) оба однородных состояния цепи становятся эквивалентными: $x_n \equiv \pm 1$, $y_{n+1} - y_n \equiv 0$ (\pm -состояния).

2.2. Уравнения движения

Гамильтониану (2) соответствует дискретная система уравнений движения

$$x''_n = \delta(x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}) - \frac{dV}{dx}(x_n) -$$

$$-(y_{n+1} - y_n) \frac{dF_+}{dx}(x_n) - (y_n - y_{n-1}) \frac{dF_-}{dx}(x_n), \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \mu y''_n &= \kappa(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) + \\ &+ F_+(x_n) - F_+(x_{n-1}) + F_-(x_{n+1}) - F_-(x_n), \end{aligned} \quad (7)$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Будем полагать, что структурное возбуждение охватывает некоторую, достаточно большую по сравнению с шагом цепи, область. Тогда оказывается применимым континуальное приближение: $x_n(\tau) = x(z, \tau)|_{z=n}$, $y_n(\tau) = y(z, \tau)|_{z=n}$, а дискретные уравнения движения (6), (7) переходят в систему двух связанных уравнений в частных производных

$$x_{\tau\tau} = \delta x_{zz} - \frac{dV}{dx}(x) - 2y_z \frac{dF_s}{dx}(x) - y_{zz} \frac{dF_a}{dx}(x), \quad (8)$$

$$y_{\tau\tau} = s_2^2 y_{zz} + \frac{1}{\mu} \frac{d}{dz} \left(2F_s(x) - \frac{d}{dz} F_a(x) \right), \quad (9)$$

где z — пространственная координата, функция

$$F_a(x) = \frac{1}{2} [F_+(x) - F_-(x)] = \chi_{1,a}(x - \xi_1) + \chi_{2,a}(\xi_1^2 - x^2),$$

$\chi_{i,a} = (\chi_{i,+} - \chi_{i,-})/2$, $i = 1, 2$, а $s_1 = 1$ и $s_2 = \sqrt{\kappa/\mu}$ — безразмерные скорости длинноволновых колебаний во внутренней и внешней подрешетках (скорости "звука"), нижние индексы τ и z обозначают дифференцирование по соответствующей переменной.

Уравнения (8) и (9) в приближении малых смещений переходят в уравнения длинноволновых колебаний одномерной решетки. При этом наклон оптической ветви дисперсионной кривой определяется знаком параметра δ . Если смещения не малы, то в рассматриваемой системе могут реализоваться нелинейные колебания и волны. Наибольший интерес для возможных приложений представляет динамика структурных возбуждений стационарного профиля. Для исследования этого класса решений перейдем к волновой переменной: $x(z, \tau) = x(\zeta)$, $y(z, \tau) = y(\zeta)$, $\zeta = z - s\tau$, где s — скорость движения возбуждения.

После перехода к переменной ζ уравнения движения (8), (9) принимают вид

$$(\delta - s^2)x_{\zeta\zeta} - \frac{dV}{dx}(x) - 2y_\zeta \frac{dF_s}{dx}(x) - y_{\zeta\zeta} \frac{dF_a}{dx}(x) = 0, \quad (10)$$

$$(s_2^2 - s^2)y_{\zeta\zeta} + \frac{1}{\mu} [2F_s(x) - (F_a(x))_\zeta]_\zeta = 0. \quad (11)$$

Интегрируя уравнения (11), получим соотношение

$$y_\zeta = \{[2F_s(x) - (F_a(x))_\zeta] \mu^{-1} - C_1\} (s^2 - s_2^2)^{-1}, \quad (12)$$

где C_1 — постоянная интегрирования, величину которой нетрудно найти по заданной асимптотике решения на бесконечности. Подставляя выражение (12) в уравнение (10), умножая последнее на x_ζ и интегрируя, получим

$$\frac{1}{2} p(x, s) x_\zeta^2 + q(x, s) = 0, \quad (13)$$

где

$$p(x, s) = \delta - s^2 + (\chi_{1,a} - 2\chi_{2,a})^2 [\mu(s^2 - s_2^2)]^{-1},$$

$$q(x, s) = -V(x) + 2(C_1 - F_s(x)\mu^{-1})F_s(x)(s^2 - s_2^2)^{-1} - C_2,$$

а C_2 — постоянная интегрирования.

Уравнение (13) представляет собой закон сохранения энергии нелинейного осциллятора с эффективной потенциальной энергией $Q(x, s) = q(x, s)/p(x, s)$. Анализируя фазовые портреты нелинейного осциллятора (13) при различных значениях скорости бегущей волны, нетрудно указать возможные классы волновых решений для уравнений (8), (9), тогда как сами решения могут быть получены в квадратурах

$$\int_{x(0)}^{x(\zeta)} \frac{du}{\sqrt{-2Q(u, s)}} = \pm \zeta. \quad (14)$$

2.3. Солитонные возбуждения бистабильной цепи

Среди возможных решений уравнений (10), (11) будем искать динамические решения, представляющие собой уединенные волны стационарного профиля с асимптотикой, соответствующей однородным состояниям системы. Этим решениям соответствуют фазовые траектории, которые являются сепаратрисами в фазовом пространстве нелинейного осциллятора (13).

Сначала рассмотрим *стационарные решения при $\delta = +1$* . В этом случае асимметричность взаимодействия подрешеток не существенна. Поэтому мы ограничимся только рассмотрением симметричного взаимодействия, когда $\chi_{i+} = \chi_{i-} = \chi_i$ ($i = 1, 2$), $F_+(x) \equiv F_-(x) \equiv F_s(x)$, а функция $F_a(x) \equiv 0$.

2.3.1. Солитонные возбуждения **b**-состояния

Найдем решение системы уравнений (10), (11) с асимптотикой

$$x \rightarrow \xi_1, \quad x_\zeta \rightarrow 0, \quad y_\zeta \rightarrow 0, \quad \zeta \rightarrow \pm\infty. \quad (15)$$

При этих условиях постоянные интегрирования $C_1 = 0$, $C_2 = 0$, а потенциал Q описывается полиномом четвертого порядка с двукратным корнем $x = \xi_1$:

$$Q(x) = a(x - \xi_1)^2[(x + \xi_1)^2 + b(x + \xi_1) + c_b], \quad (16)$$

где

$$a = \frac{g_0}{s^2 - 1} \left[1 + \frac{2\chi_2^2}{g_0\mu(s^2 - s_2^2)} \right],$$

$$b = \frac{-4\chi_1\chi_2}{g_0\mu(s^2 - s_2^2)} \left[1 + \frac{2\chi_2^2}{g_0\mu(s^2 - s_2^2)} \right]^{-1},$$

$$c_b = 2 \left[\xi_1^2 - 1 + \frac{\chi_1^2}{g_0\mu(s^2 - s_2^2)} \right] \left[1 + \frac{2\chi_2^2}{g_0\mu(s^2 - s_2^2)} \right]^{-1}.$$

Таким образом, $Q(x)$, кроме двукратного корня $x = \xi_1$, имеет еще два действительных корня $\varphi_1 = -\xi_1 - (b/2) - \sqrt{D_b}$, $\varphi_2 = -\xi_1 - (b/2) + \sqrt{D_b}$ при $D_b = (b/2)^2 - c_b \geq 0$.

Из явного вида (16) потенциала $Q(x)$ следует, что необходимым и достаточным условием существования ограниченных решений уравнения (13) с асимптотикой (15) является выполнение либо неравенств

$$a < 0, \quad \varphi_1 > \xi_1, \quad D_b > 0, \quad (17)$$

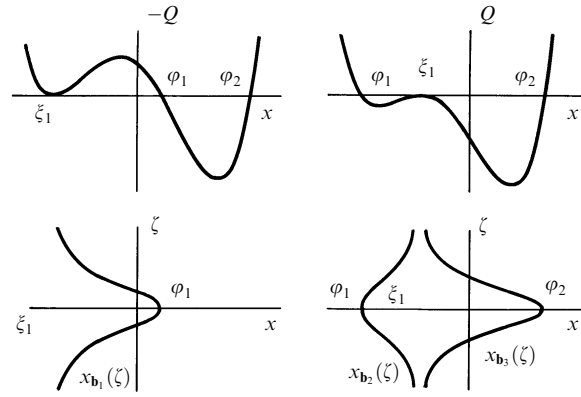


Рис. 2. Вид **b**-солитонных решений $x_{b_1}(\zeta)$, $x_{b_2}(\zeta)$, $x_{b_3}(\zeta)$

либо неравенств

$$a > 0, \quad \varphi_1 < \xi_1, \quad D_b > 0. \quad (18)$$

При выполнении неравенств (17) дифференциальное уравнение (13) будет иметь одно солитонное решение $\xi_1 < x_{b_1}(\zeta) \leq \varphi_1$, а при выполнении неравенств (18) — два солитонных решения $\varphi_1 \leq x_{b_2}(\zeta) < \xi_1$ и $\xi_1 < x_{b_3}(\zeta) \leq \varphi_2$ (рис. 2).

Действительно, если справедливы неравенства (17), то интегральное уравнение (14) будет иметь вид

$$\int_{x(\zeta)}^{\varphi_1} \frac{du}{(u - \xi_1)\sqrt{(\varphi_1 - u)(\varphi_2 - u)}} = \sqrt{-2a}\zeta,$$

откуда нетрудно получить явный вид солитона b_1

$$x_{b_1}(\zeta) = \xi_1 + \frac{2(\varphi_1 - \xi_1)(\varphi_2 - \xi_1)}{\varphi_1 + \varphi_2 - 2\xi_1 + (\varphi_2 - \varphi_1) \cosh(R_b \zeta)}, \quad (19)$$

где $R_b = \sqrt{2a(\varphi_1 - \xi_1)(\varphi_2 - \xi_1)}$.

Если же справедливы неравенства (18), интегральное уравнение (14) будет иметь вид

$$\int_{x(\zeta)}^{x(0)} \frac{du}{(u - \xi_1)\sqrt{(u - \varphi_1)(\varphi_2 - u)}} = \sqrt{2a}\zeta,$$

где $x(0) = \varphi_1$ для солитона b_2 и $x(0) = \varphi_2$ для солитона b_3 . Отсюда имеем явный вид солитонов b_2, b_3

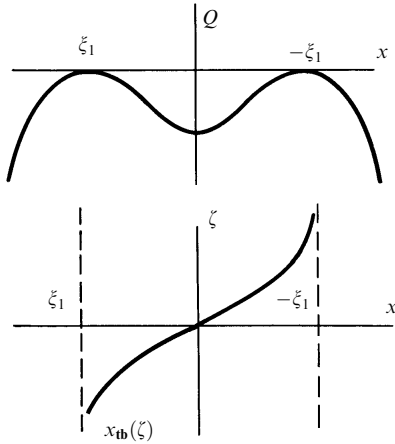
$$x_{b_{2,3}}(\zeta) = \xi_1 + \frac{2(\varphi_1 - \xi_1)(\varphi_2 - \xi_1)}{\varphi_1 + \varphi_2 - 2\xi_1 \pm (\varphi_2 - \varphi_1) \cosh(R_b \zeta)}. \quad (20)$$

Вид второй компоненты решения $\rho_b(\zeta) = dy_b(\zeta)/d\zeta$ находится из уравнения (12)

$$\rho_{b_k}(\zeta) = \frac{2}{\mu(s^2 - s_2^2)} F(x_{b_k}(\zeta)), \quad k = 1, 2, 3. \quad (21)$$

Как следует из явного вида **b**-солитонов (19)–(21), при $\zeta \rightarrow \pm\infty$ $x_b(\zeta) \rightarrow \xi_1$, $\rho_b(\zeta) \rightarrow 0$, т.е. **b**-солитоны являются локальными возмущениями **b**-состояния.

Солитоны b_1, b_2, b_3 имеют колоколообразный профиль по компоненте x и кинкообразный — по компоненте y . Они характеризуются амплитудами по первой и второй компонентам — $A_x = x_b(0) - \xi_1$ и $A_y = \rho_b(0)$,

Рис. 3. Вид топологического солитона $x_{\text{tb}}(\xi)$

шириной

$$L_{\text{b}} = \int_{-\infty}^{+\infty} |(x_{\text{b}}(\xi) - \xi_1)(x_{\text{b}}(0) - \xi_1)^{-1}| d\xi,$$

измеряемой в постоянных решетки, и энергией E , отсчитываемой от уровня энергии \mathbf{b} -состояния.

Спектр скоростей солитона \mathbf{b}_1 определяется неравенствами (17), а солитонов $\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ — неравенствами (18). Общее для обеих систем условие $D_{\text{b}} > 0$ эквивалентно неравенству $s_{p_1} < s < s_2$, где

$$s_{p_1} = s_2 \sqrt{1 - \frac{2\chi_2^2}{g_0\kappa} - \frac{\chi_1^2}{g_0\kappa(\xi_1^2 - 1)}}.$$

Заметим, что в силу условия (5), $0 < s_{p_1} < s_2$.

Неравенство $a < 0$ определяет область значений скорости $0 \leq s < \min(1, s_{p_2})$, $\max(1, s_{p_2}) < s < s_2$ при $s_2 > 1$ и область $0 \leq s < s_{p_2}$, $s_2 < s < 1$ при $s_2 < 1$. Здесь

$$s_{p_2} = s_2 \sqrt{1 - 2\chi_2^2(g_0\kappa)^{-1}} \geq s_{p_1}.$$

Условие $\varphi_1 > \xi_1$ определяет область значений $0 \leq s < \min(1, s_{p_3})$, $\max(1, s_{p_3}) < s < s_2$, где

$$s_{p_3} = s_2 \sqrt{1 - (\chi_1 - 2\chi_2\xi_1)^2[g_0\kappa(3\xi_1^2 - 1)]^{-1}} \geq s_{p_1}.$$

Следовательно, солитон \mathbf{b}_1 в общем случае будет иметь двухзонный спектр скоростей

$$s_{p_1} < s < \min(1, s_{p_2}, s_{p_3}), \quad \max(1, s_{p_2}, s_{p_3}) < s < s_2. \quad (22)$$

При $s_2 > 1$ спектр скоростей будет двухзонным, только если $s_{p_1} < 1$, $s_{p_2}, s_{p_3} > s_{p_1}$ и $s_{p_2} < s_2$. При $s_2 < 1$ солитон \mathbf{b}_1 может иметь только однозонный спектр.

Неравенство $a > 0$ определяет область значений скоростей $\min(1, s_{p_2}) < s < \max(1, s_{p_2})$, а условие $\varphi_1 < \xi_1$ — область $0 \leq s < \min(1, s_{p_3})$, $\max(1, s_{p_3}) < s < s_2$. Отсюда следует, что солитоны $\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ имеют однозонный спектр скоростей $\min(1, s_{p_2}) < s < \min(1, s_{p_3})$ при $s_{p_2} < s_{p_3}$ и однозонный спектр $\max(1, s_{p_3}) < s < \max(1, s_{p_2})$ при $s_{p_2} > s_{p_3}$.

Кроме найденных \mathbf{b} -солитонных решений, являющихся локальными возмущениями \mathbf{b} -состояния, система уравнений (10), (11) допускает решение, описывающее переход из состояния \mathbf{b} в метастабильное состояние \mathbf{me} , топологически близкое к состоянию \mathbf{e} .

Действительно, при $s = s_{p_1}$ и $a < 0$ потенциал (25) будет иметь два двукратных корня $x = \xi_1$, $x = \varphi^0 = -\xi_1 - (b/2)$. Интегральное уравнение (14) приобретает вид

$$\int_{(\xi_1 + \varphi^0)/2}^{x(\xi)} \frac{du}{(u - \xi_1)(\varphi^0 - u)} = \pm \sqrt{-2a} \xi.$$

Отсюда имеем явный вид топологического солитона \mathbf{tb}_{\pm}

$$x_{\text{tb}_{\pm}}(\xi) = \frac{1}{2}(\xi_1 + \varphi^0) \pm \frac{1}{2}(\varphi^0 - \xi_1) \tanh(R_{\text{tb}}\xi), \quad (23)$$

где $R_{\text{tb}} = (\xi_1 - \varphi^0)\sqrt{-a/2}$ (рис. 3). Вид второй компоненты решения $\rho_{\text{tb}_{\pm}}(\xi) = dy_{\text{tb}_{\pm}}(\xi)/d\xi$ находится из уравнения (12)

$$\rho_{\text{tb}_{\pm}}(\xi) = 2F(x_{\text{tb}_{\pm}}(\xi))[\mu(s_{p_1}^2 - s_2^2)]^{-1}. \quad (24)$$

При $\xi \rightarrow \pm\infty$, $x_{\text{tb}_{\pm}}(\xi) \rightarrow \xi_1$, $x_{\text{tb}_{\mp}}(\xi) \rightarrow \varphi^0$, $\rho_{\text{tb}_{\pm}}(\xi) \rightarrow 0$, $\rho_{\text{tb}_{\mp}}(\xi) \rightarrow \rho_{\text{me}} = 2F(\varphi^0)/\mu(s_{p_1}^2 - s_2^2)$, т.е. топологический солитон \mathbf{tb}_{\pm} описывает переход цепочки из состояния \mathbf{b} в метастабильное состояние \mathbf{me} $\{x_n \equiv \varphi^0, y_{n+1} - y_n \equiv \rho_{\text{me}}, y'_n \equiv s_{\text{b}}\}$, $s_{\text{b}} = -s_{p_1}\rho_{\text{me}}$. Энергия метастабильного состояния \mathbf{me} выше энергии состояния \mathbf{b} , поэтому в зависимости от направления движение солитона \mathbf{tb} будет сопровождаться либо выделением, либо поглощением энергии. Ширина солитона $L_{\text{tb}} = (\varphi^0 - \xi_1)/x'_{\text{tb}}(0) = 2/R_{\text{tb}}$.

Необходимым условием существования солитона \mathbf{tb}_{\pm} является выполнение неравенства $a(s_{p_1}) < 0$. Заметим, что при $\chi_1 = 0$ $s_{p_1} = s_{p_2}$, $a(s_{p_1}) = 0$, поэтому солитон \mathbf{tb}_{\pm} может существовать только при $\chi_1 \neq 0$.

2.3.2. Солитонные возбуждения \mathbf{e} -состояния

Найдем решение системы уравнений (10), (11) с асимптотикой

$$x \rightarrow \eta_2, \quad x_{\xi} \rightarrow 0, \quad y_{\xi} \rightarrow \rho_{\text{e}}, \quad \xi \rightarrow \pm\infty. \quad (25)$$

При данных условиях постоянные интегрирования

$$C_1 = 2F(\eta_2)s^2\kappa^{-1}, \\ C_2 = -V(\eta_2) + 2F^2(\eta_2)(2s^2 - s_2^2)[\kappa(s^2 - s_2^2)]^{-1}.$$

Тогда потенциал Q имеет вид

$$Q(x) = a(x - \eta_2)^2[(x + \eta_2)^2 + b(x + \eta_2) + c_{\text{e}}], \quad (26)$$

где

$$c_{\text{e}} = 2 \left[d + \frac{\chi_1^2}{g_0\mu(s^2 - s_2^2)} \right] \left[1 + \frac{2\chi_2^2}{g_0\mu(s^2 - s_2^2)} \right]^{-1}, \\ d = \eta_2^2 - 1 + \frac{2\chi_2 F(\eta_2)}{\kappa g_0} < 0.$$

Полином четвертого порядка $Q(x)$, кроме двукратного корня $x = \eta_2$, имеет еще два действительных корня

$$\theta_1 = -\eta_2 - \frac{1}{2}b - \sqrt{D_{\text{e}}}, \quad \theta_2 = -\eta_2 - \frac{1}{2}b + \sqrt{D_{\text{e}}}$$

при $D_{\text{e}} = (b/2)^2 - c_{\text{e}} \geq 0$. Из вида (26) потенциала Q следует, что необходимым и достаточным условием существования ограниченных решений уравнения (13) с асимптотикой (25) является выполнение либо неравенств

$$a < 0, \quad \theta_2 < \eta_2, \quad D_{\text{e}} > 0, \quad (27)$$

либо неравенств

$$a > 0, \quad \theta_2 > \eta_2, \quad D_e > 0. \quad (28)$$

При выполнении условий (27) дифференциальное уравнение (13) будет иметь одно солитонное решение $\theta_2 < x_{e_1}(\zeta) \leq \eta_2$, а при выполнении неравенств (28) — два солитонных решения $\theta_1 \leq x_{e_2}(\zeta) < \eta_2$ и $\eta_2 < x_{e_3}(\zeta) \leq \theta_2$. Явный вид солитонов e_1 , e_2 , e_3 находится, так же как и явный вид солитонов b_1 , b_2 , b_3 . Решение e_1

$$x_{e_1}(\zeta) = \eta_2 + \frac{2(\theta_1 - \eta_2)(\theta_2 - \eta_2)}{\theta_1 + \theta_2 - 2\eta_2 - (\theta_2 - \theta_1) \cosh(R_e \zeta)}, \quad (29)$$

а решения e_2 , e_3

$$x_{e_{2,3}}(\zeta) = \eta_2 + \frac{2(\theta_1 - \eta_2)(\theta_2 - \eta_2)}{\theta_1 + \theta_2 - 2\eta_2 \pm (\theta_2 - \theta_1) \cosh(R_e \zeta)}, \quad (30)$$

где $R_e = \sqrt{2a(\theta_1 - \eta_2)(\theta_2 - \eta_2)}$. Вид второй компоненты решения $\rho_e(\zeta) = dy_e(\zeta)/d\zeta$ следует из уравнения (12)

$$\rho_{e_k}(\zeta) = 2(s_2^2 F(x_{e_k}(\zeta)) - s_2^2 F(\eta_2))[\kappa(s^2 - s_2^2)]^{-1}, \quad k = 1, 2, 3. \quad (31)$$

Из явного вида e -солитонов (29), (30) и (31) следует, что при $\zeta \rightarrow \pm\infty$ $x_e(\zeta) \rightarrow \eta_2$, $\rho_e(\zeta) \rightarrow \rho_e$, т.е. e -солитоны являются локальными возмущениями e -состояния.

Солитоны e_1 , e_2 , e_3 имеют колоколообразный профиль по компоненте x и кинкообразный — по компоненте y . Они характеризуются амплитудами по первой и второй компонентам — $A_x = \eta_2 - x_e(0)$ и $A_y = \rho_e(0) - \rho_e$, шириной

$$L_e = \int_{-\infty}^{+\infty} |(x_e(\zeta) - \eta_2)(x_e(0) - \eta_2)^{-1}| d\zeta,$$

измеряемой в постоянных решетке, и энергией E , отсчитываемой от уровня энергии e -состояния. Спектр скоростей солитона e_1 определяется неравенствами (27), а солитонов e_2 , e_3 — неравенствами (28).

Кроме полученных e -солитонных решений, система уравнений (10), (11) допускает решение, описывающее переход из состояния e в метастабильное состояние mb , топологически близкое к состоянию b .

Действительно, при скорости $s = s_{p_4}$,

$$s_{p_4} = s_2 \sqrt{1 - \frac{2\chi_2^2}{g_0 \kappa} - \frac{\chi_1^2}{g_0 \kappa d}},$$

дискриминант $D_e = 0$, поэтому потенциал (26) будет полиномом четвертого порядка с двумя двукратными корнями $x = \eta_2$, $x = \theta^0 = -(b/2)$. Солитонное решение te_{\pm} существует только при $a(s_{p_4}) < 0$ и имеет вид

$$x_{te_{\pm}}(\zeta) = \frac{1}{2}(\eta_2 + \theta^0) \pm \frac{1}{2}(\eta_2 - \theta^0) \tanh(R_{te} \zeta), \quad (32)$$

где $R_{te} = (\eta_2 - \theta^0) \sqrt{-a/2}$. Вид второй компоненты решения $\rho_{te_{\pm}}(\zeta) = dy_{te_{\pm}}(\zeta)/d\zeta$ находится из уравнения (12)

$$\rho_{te_{\pm}}(\zeta) = 2(s_2^2 F(x_{te_{\pm}}(\zeta)) - s_{p_4}^2 F(\eta_2))[\kappa(s_{p_4}^2 - s_2^2)]^{-1}. \quad (33)$$

При $\zeta \rightarrow \pm\infty$ $x_{te_{\pm}}(\zeta) \rightarrow \eta_2$, $x_{te_{\mp}}(\zeta) \rightarrow \theta^0$, $\rho_{te_{\pm}}(\zeta) \rightarrow \rho_e$, $\rho_{te_{\mp}}(\zeta) \rightarrow \rho_{mb} = 2(s_2^2 F(\theta^0) - s_{p_4}^2 F(\eta_2))/\kappa(s_{p_4}^2 - s_2^2)$, т.е. топологический солитон te_{\pm} описывает переход цепочки из

состояния e в метастабильное состояние mb $\{x_n \equiv \theta^0, y_{n+1} - y_n \equiv \rho_{mb}, y'_n \equiv s_e\}$, $s_e = -s_{p_4}(\rho_{me} - \rho_e)$.

Энергия метастабильного состояния mb выше энергии состояния e , поэтому движение солитона te будет сопровождаться выделением, либо поглощением энергии в зависимости от направления его движения. Ширина солитона $L_{te} = (\eta_2 - \theta^0)/x'_{te}(0) = 2/R_{te}$.

Необходимым условием существования топологического солитона te_{\pm} является выполнение неравенства $a(s_{p_4}) < 0$. Заметим, что при $\chi_1 = 0$ $s_{p_4} = s_{p_2}$, $a(s_{p_4}) = 0$, поэтому солитон te_{\pm} , так же как и солитон tb_{\pm} , может существовать только при $\chi_1 \neq 0$.

Рассмотрим стационарные решения при $\delta = -1$. Для упрощения выкладки ограничимся рассмотрением случая $\chi_{2,+} = \chi_{2,-} = 0$.

Как и в случае $\delta = +1$, рассмотрим вначале солитонное возбуждение b -состояния, т.е. найдем решения системы (10), (11) с асимптотикой (15). При этом эффективный потенциал Q нелинейного осциллятора (13) будет полиномом четвертого порядка (16) с коэффициентами

$$a = g_0 \left[1 + s^2 + \frac{\chi_{1,a}^2}{\mu(s^2 - s_2^2)} \right]^{-1}, \quad b = 0, \\ c_b = 2 \left[\xi_1^2 - 1 - \frac{\chi_{1,s}^2}{g_0 \mu(s^2 - s_2^2)} \right].$$

В данном случае условие $a < 0$ несовместимо с условием $c_b \leq 0$, поэтому солитоны b_1 , tb_{\pm} существовать не могут. Таким образом, на фоне b -состояния могут существовать только нетопологические солитоны b_2 , b_3 .

Рассмотрим далее солитонные возбуждения e -состояния. Найдем решения системы (10), (11) с асимптотикой (25). В этом случае эффективный потенциал Q будет полиномом четвертого порядка (26) с коэффициентом $c_e = 2\{\eta_2^2 - 1 + [\chi_{1,s}^2/g_0 \mu(s^2 - s_2^2)]\}$. Здесь условия $a < 0$ и $c_e \leq 0$ совместимы и определяют спектр скоростей солитона e_1 : $s_{p_5} < s < s_{p_6}$, где скорость топологического солитона s_{p_5} находится из условия $c_e(s) = 0$, а скорость s_{p_6} — из условия $a(s) = 0$. Скорость $s_{p_5} = s_2[1 + \chi_{1,s}^2/g_0 \mu(1 - \eta_2^2)]^{1/2} > s_2$, а скорость $s_{p_6} = \{[s_2^2 - 1 + ((s_2^2 + 1)^2 + 4\chi_{1,a}^2)/2]^{1/2}/2\}^{1/2}$. Заметим, что при симметричном взаимодействии подрешеток ($\chi_{1,a} = 0$) солитоны e_1 , te_{\pm} существовать не могут, так как в этом случае ($s_{p_6} = s_2 < s_{p_5}$). Поэтому при $\delta = -1$ асимметричность взаимодействия подрешеток ($\chi_{1,a} > \chi_p$, где χ_p находится из условия $s_{p_6} = s_{p_5}$) является необходимым условием существования солитонов e_1 , te_{\pm} .

Солитон te_{\pm} существует только при одном значении скорости $s = s_{p_5}$ и имеет вид $x_{te_{\pm}}(\zeta) = \pm \eta_2 \tanh(R_{te} \zeta)$, где $R_{te} = \eta_2 \sqrt{-2a(s_{p_5})}$. Вторая компонента решения находится из уравнения (12).

Проведенный в этом разделе анализ показывает, что в бистабильной цепочке с невырожденными основными состояниями наряду с нетопологическими солитонами при фиксированных значениях скорости могут существовать топологические солитоны tb_{\pm} , te_{\pm} , переводящие цепочку из одного начального равновесного состояния в промежуточное стационарное состояние в области притяжения другого равновесного состояния. Данные солитоны существуют благодаря взаимодействию подрешеток, приводящем к динамическому вырождению эффективного потенциала фазового перехода при определенном значении скорости.

3. Численное моделирование динамики солитонов в бистабильной цепочке

Проведенное аналитическое исследование солитонных режимов движения выполнено на основе длинноволнового приближения. В связи с этим возникает вопрос об учете дискретности решетки. Кроме того, необходимо исследовать устойчивость солитонных решений.

Рассмотрим динамику солитонов при двух предельных типах взаимодействия подрешеток: $\chi_{2,\pm} = 0$ и $\chi_{1,\pm} = 0$. В первом случае уменьшение на ρ шага внешней подрешетки прежде всего приводит к уменьшению разницы уровней энергий основных состояний эффективного двухъямного потенциала $V(x) + 2\chi_{1,s}\rho(x - \xi_1)$. Такое взаимодействие подрешеток использовалось в работах [20, 22, 23] при моделировании распространения экзотермических реакций в квазиодномерных молекулярных кристаллах. Во втором случае уменьшение на ρ шага внешней подрешетки связано с изменением высоты барьера между двумя основными состояниями эффективного двухъямного потенциала $V(x) + 2\chi_{2,s}\rho(\xi_1^2 - x^2)$. Такой тип взаимодействия подрешеток был использован в работах [7, 24, 25] при моделировании транспорта протонов в квазиодномерных цепочках водородных связей и затем в работах [10–12, 26] для моделирования динамики локальных конформационных переходов в молекулах ДНК.

Рассмотрим сначала динамику солитонов в цепи с $\chi_{1,\pm} = \chi_1$, $\chi_{2,\pm} = 0$ и $\delta = +1$. В такой цепи условие бистабильности (5) имеет вид

$$\chi_1 < \chi_{p_1} = \sqrt{\kappa g_0(\xi_1^2 - 1)}. \quad (34)$$

При выполнении этого неравенства рассматриваемая двухкомпонентная система имеет два устойчивых состояния: энергетически более выгодное — **b** и энергетически менее выгодное — **e**.

Спектр допустимых скоростей солитонов **b**₁, **b**₂, **b**₃ был получен в предыдущем разделе. В рассматриваемом случае взаимодействия подрешеток

$$s_{p_1} = s_2 \sqrt{1 - \chi_1^2 [g_0 \kappa (\xi_1^2 - 1)]^{-1}}, \quad s_{p_2} = s_2, \\ s_{p_3} = s_2 \sqrt{1 - \chi_1^2 [g_0 \kappa (3\xi_1^2 - 1)]^{-1}}.$$

При выполнении условия бистабильности (34) $0 < s_{p_1} < s_{p_3} < s_2$. Поэтому солитон **b**₁ будет иметь двухзонный спектр скоростей (22)

$$s_{p_1} < s < \min(1, s_{p_3}), \quad \max(1, s_{p_3}) < s < s_2,$$

если $s_2 > 1$, и однозонный спектр $s_{p_1} < s < s_{p_3}$, если $s_2 < 1$. Солитоны **b**₂, **b**₃ имеют однозонный спектр скоростей $\max(1, s_{p_3}) < s < \max(1, s_2)$, т. е. существуют только при $s_2 > 1$.

Топологический солитон **tb** имеет только одно допустимое значение скорости $s = s_{p_1}$ и существует при значениях χ_1 , для которых $s_{p_1} < 1$.

Спектр скоростей солитона **e**₁ определяется из неравенства (27). Неравенство $a < 0$ определяет область значений $s < 1$, условие $D_e > 0$ — область $0 \leq s < s_2$, $s_{p_4} < s < \infty$ при $\chi_1 < \chi_{p_2}$ и область $s_{p_4} < s < s_2$ при $\chi_{p_2} < \chi_1 < \chi_{p_1}$, где $s_{p_4} = s_2(1 - R)^{1/2}$ при $R = \chi_1^2 / g_0 \kappa (\eta_2^2 - 1) < 1$ и $s_{p_4} = 0$ при $R \geq 1$, а $\chi_{p_2} = [\kappa g_0 (\xi_1^2 + \xi_1)]^{1/2} < \chi_{p_1}$. Если $\chi < \chi_{p_2}$, то $\eta_2 < 1$, $s_{p_4} > s_2$, а если $\chi_{p_2} < \chi_1 < \chi_{p_1}$, то $1 < \eta_2 < \xi_1$, $s_{p_4} < s_2$. Условие $\theta_2 < \eta_2$ определяет область значений $0 \leq s < s_{p_1}$, $s_2 < s < \infty$, где

$$s_{p_7} = s_2 \sqrt{1 - \chi_1^2 [g_0 \kappa (3\eta_2^2 - 1)]^{-1}} > s_{p_1}.$$

Отсюда солитон **e**₁ при $\chi_1 < \chi_{p_2}$ имеет двухзонный спектр скоростей

$$0 \leq s < \min(1, s_{p_7}), \quad s_{p_4} < s < 1,$$

а при $\chi_{p_2} < \chi_1 < \chi_{p_1}$ — однозонный спектр $s_{p_4} < s < \min(1, s_{p_7})$.

Спектр скоростей солитонов **e**₂, **e**₃ определяется из системы неравенств (28). Неравенство $a > 0$ определяет область значений $s > 1$, а условие $\theta_2 < \eta_2$ — область $s_{p_7} < s < s_2$. Поэтому солитоны имеют однозонный спектр $\max(1, s_{p_7}) < s < s_2$, т. е. существуют только при $s_2 > 1$.

Топологический солитон **te** имеет только одно допустимое значение скорости $s = s_{p_4}$ и существует при значениях $\chi_1 < \chi_{p_3}$, где пороговое значение $\chi_{p_3} < \chi_{p_2}$ находится из уравнения $s_{p_4}(\chi_{p_3}) = 1$.

В молекулярных цепочках смещения по компоненте x соответствуют внутримолекулярные смещения, приводящие к деформациям сравнительно жестких валентных связей, а по внешней компоненте y — смещения молекул друг относительно друга, приводящие только к деформациям мягких невалентных связей. Поэтому жесткость внутренней подрешетки, как правило, выше жесткости внешней подрешетки $s_1 = 1 > s_2$. Рассмотрим динамику солитонов в этом типичном случае, когда могут существовать солитоны **b**₁, **tb**, **e**₁, **te**.

Зависимость параметров **e**-состояния η_2 , ρ_e , E_e и граничных значений спектров скоростей s_{p_1} , s_{p_3} , s_{p_4} , s_{p_7} от параметра взаимодействия подрешетки χ_1

χ_1	η_2	ρ_e	E_e	s_{p_1}	s_{p_3}	s_{p_5}	s_{p_4}
0,000	0,930403	0,000000	0,009980	0,500000	0,500000	0,500000	0,500000
0,002	0,932390	-0,031884	0,009853	0,496605	0,499830	0,499751	0,503052
0,004	0,938292	-0,063864	0,009472	0,486276	0,499320	0,499024	0,513203
0,006	0,947945	-0,096259	0,008832	0,468557	0,498469	0,497873	0,534325
0,008	0,961097	-0,129187	0,007925	0,442559	0,497275	0,496373	0,577830
0,010	0,977440	-0,162792	0,006742	0,406699	0,495735	0,494612	0,688594
0,011	0,986705	-0,179886	0,006043	0,384238	0,494834	0,493660	0,841482
0,012	0,996641	-0,197193	0,005271	0,358024	0,493847	0,492673	1,548257
0,013	1,007207	-0,214725	0,004423	0,327159	0,492770	0,491660	0,000000
0,014	1,018363	-0,232491	0,003497	0,290157	0,491605	0,490628	0,000000
0,016	1,042287	-0,268767	0,001404	0,182848	0,489007	0,488537	0,000000
0,017	1,054981	-0,287291	0,000233	0,074274	0,487572	0,484870	0,000000

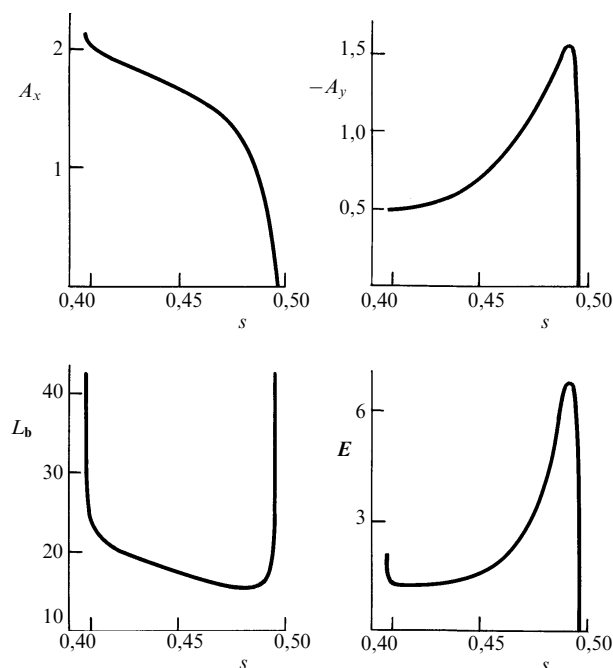


Рис. 4. Зависимость амплитуд A_x , A_y , ширины L_b , данной в периодах цепочки, энергии E , отсчитываемой от уровня энергии **b**-конформации, солитона \mathbf{b}_1 от скорости s при $g_0 = 0,01$, $g_1 = 0,005$, $\mu = 1$, $\kappa = 0,25$ ($s_2 = 0,5$), $\chi_1 = 0,01$, $\chi_2 = 0$

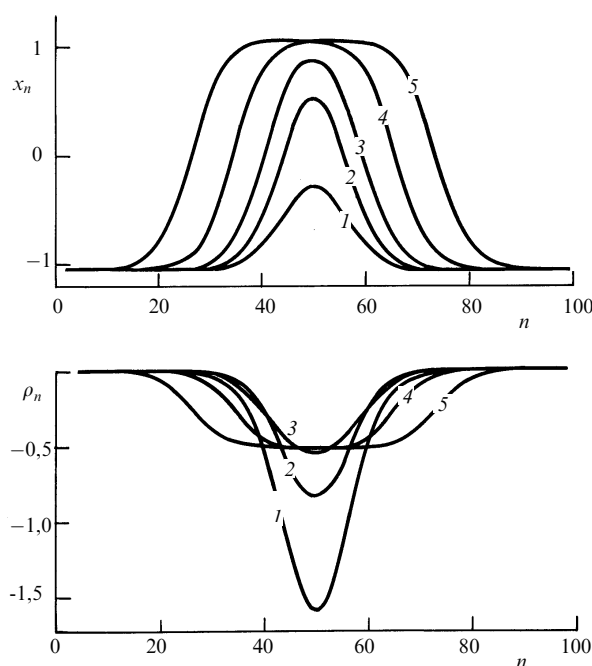


Рис. 5. Переход солитона \mathbf{b}_1 в пару топологических солитонов \mathbf{tb}_+ , \mathbf{tb}_- при $s \rightarrow s_{p_1}$ в цепочке с $g_0 = 0,01$, $g_1 = 0,005$, $\mu = 1$, $\kappa = 0,25$, $\chi_1 = 0,01$, $\chi_2 = 0$. Графики солитона \mathbf{b}_1 даны при $s = 0,49, 0,46, 0,42, 0,407$ и $0,4067$ (кривые 1–5)

Для определенности положим всюду в дальнейшем $s_2 = 0,5$, $\mu = 1$, $\kappa = 0,25$, $g_0 = 0,01$, $g_1 = 0,005$. Тогда $\xi_1 = -1,057454$, $g_2 = 0,005148$, $\chi_{p_1} = 0,017191$, $\chi_{p_2} = 0,012324$. Зависимости внутримолекулярной координаты η_2 , сжатия внешней подрешетки ρ_e , уровня энергии E_e е-состояния и граничных значений скоростей s_{p_1} , s_{p_3} , s_{p_4} , s_{p_7} от значения параметра взаимодействия подрешеток χ_1 представлены в таблице. Как видно из таблицы, солитон **te** существует только при $\chi_1 \leq 0,011$, где его скорость $s_{p_4} > s_2$.

Солитон \mathbf{b}_1 имеет однозонный спектр скоростей (s_{p_1} , s_{p_3}). При $\chi_1 = 0,01$ $s_{p_1} = 0,406699$, $s_{p_3} = 0,495735$. Зависимость амплитуд A_x , A_y , ширины L_b , энергии E солитона \mathbf{b}_1 от скорости s показана на рис. 4. Заметим, что монотонно от s зависит только амплитуда A_x . При $s \rightarrow s_{p_3}$ $A_x \rightarrow 0$, $A_y \rightarrow 0$, $L_b \rightarrow \infty$, $E \rightarrow 0$. Профили солитона при разных скоростях представлены на рис. 5. При $s \rightarrow s_{p_1}$ ширина солитона и его энергия монотонно растут. В пределе из одного солитона \mathbf{b}_1 получается два топологических солитона \mathbf{tb}_+ , \mathbf{tb}_- . Рост ширины солитона \mathbf{b}_1 объясняется расхождением центров топологических солитонов, а рост энергии — тем, что метастабильная конформация **me**, в которой находится участок цепи между центрами топологических солитонов, имеет более высокую энергию, чем состояние **b**, в котором находятся концы цепи.

Динамику нетопологических **b**- и **e**-солитонов удобно исследовать при периодических граничных условиях. Для этого от уравнений (6), (7) перейдем к системе

$$x_n'' = x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1} - \frac{dV}{dx}(x_n) - (\rho_n + \rho_{n-1}) \frac{dF_s}{dx}(x_n), \quad (35)$$

$$\mu \rho_n'' = \kappa(\rho_{n+1} - 2\rho_n + \rho_{n-1}) + F_s(x_{n+2}) - F_s(x_{n+1}) - F_s(x_n) + F_s(x_{n-1}), \quad (36)$$

где $\rho_n = y_{n+1} - y_n$ — относительные смещения n -го узла внешней подрешетки, $n = 1, \dots, N$, N — число звеньев цепочки ($n+1=1$, $n+2=2$ при $n=N$, $n+2=1$ при $n=N-1$, $n-1=N$ при $n=1$). Начальные условия выбираются соответствующими точным солитонным решениям (19), (20), (21) и (29), (30), (31).

Численное моделирование динамики солитона \mathbf{b}_1 показало его устойчивость только при скоростях s близких к s_{p_1} . Так, в циклической цепочке из $N = 200$ молекул при начальной скорости $s = 0,40699$ и $s = 0,41$ он двигался с постоянной скоростью и сохранением формы, проходя за время $\tau = 1200\,489$ ячейки цепочки при начальной скорости $s = 0,40699$ и 492 при $s = 0,41$. Энергия солитона с ростом скорости при $s < 0,42$ монотонно уменьшается, а при $s > 0,42$ монотонно растет (см. рис. 4). Минимум энергии достигается при $s = 0,42$. При $s \geq 0,42$ солитон неустойчив. Движение солитона приводит к его торможению до скорости, близкой к s_{p_1} , с которой он уже движется устойчиво.

Солитон \mathbf{e}_1 при $\chi_1 = 0,01$ имеет двухзонный спектр скоростей $0 \leq s < s_{p_7}$, $s_{p_4} < s < 1$ ($s_{p_7} = 0,494612$, $s_{p_4} = 0,688594$). У солитона из первой зоны спектра скоростей в области локализации происходит растяжение внешней подрешетки, а у солитона из второй зоны — сжатие. Вид профиля солитона при s из второй зоны представлен на рис. 6.

При $s \rightarrow s_{p_4}$ ширина солитона и его энергия монотонно растут. В пределе из одного солитона \mathbf{e}_1 получается два топологических солитона \mathbf{te}_- , \mathbf{te}_+ . Рост ширины солитона \mathbf{e}_1 объясняется расхождением центров топологических солитонов, а рост энергии — тем, что метастабильное состояние **mb**, в котором находится участок цепочки между центрами топологических солитонов, имеет более высокую энергию, чем состояние **e**, в котором находятся концы цепочки. По мере приближе-

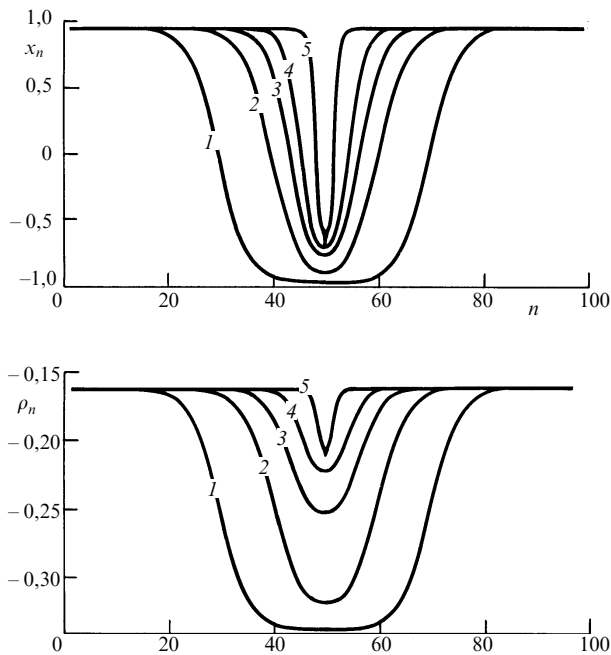


Рис. 6. Профили солитона e_1 в цепочке с $g_0 = 0,01$, $g_1 = 0,005$, $\mu = 1$, $\kappa = 0,25$, $\chi_1 = 0,01$, $\chi_2 = 0$ при s из второй зоны спектра скоростей, $s = 0,6886, 0,7, 0,8, 0,9$ и $0,99$ (кривые 1–5)

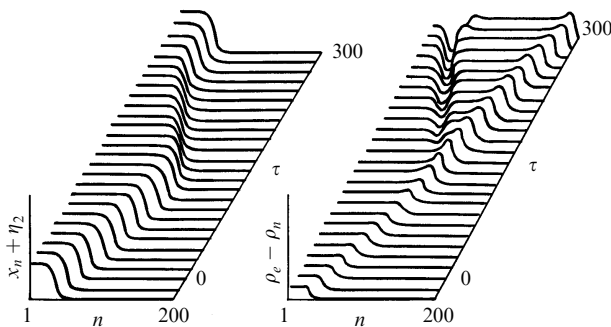


Рис. 7. Распад топологического te_+ -солитона при $s = s_{p_4}$ в цепочке с $g_0 = 0,01$, $g_1 = 0,005$, $\mu = 1$, $\kappa = 0,25$, $\chi_1 = 0,01$, $\chi_2 = 0$

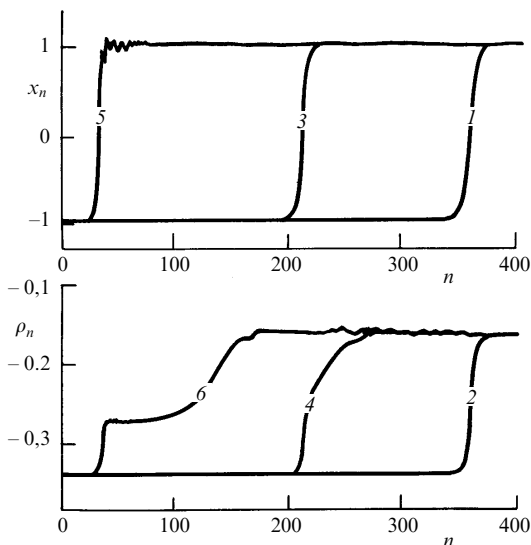


Рис. 8. Распад топологического te_- -солитона при $s = -s_{p_4}$ в цепочке с $g_0 = 0,01$, $g_1 = 0,005$, $\mu = 1$, $\kappa = 0,25$, $\chi_1 = 0,01$, $\chi_2 = 0$. Приведен профиль солитона в начальный момент времени $\tau = 0$ (кривые 1,2), при $\tau = 200$ (кривые 3,4) и $\tau = 400$ (кривые 5,6)

ния скорости к правому краю второй зоны спектра скоростей, амплитуда солитона монотонно уменьшается, ширина стремится к нулю, а энергия — к бесконечности.

Численное моделирование динамики солитона e_1 показало его неустойчивость в обоих интервалах спектра скоростей. При движении солитон либо распадается на два кинка, переводящих цепочку из состояния e в более энергетически выгодную конформацию b , либо из него образуется двухкомпонентный бризер, сопровождающийся излучением малоамплитудных фононов.

Динамика топологических солитонов tb , te моделировалась в конечной системе из $N = 400$ молекул со свободным правым и с закрепленным левым концом, движущимся равномерно со скоростью s_k , где $s_k = s_b = -s_{p_1}\rho_{mb}$ для солитона tb и $s_k = s_e = -s_{p_4}(\rho_{me} - \rho_e)$ для солитона te .

Динамика цепочки определяется системой уравнений

$$x_1'' = x_2 - x_1 - \frac{dV}{dx}(x_1) - (y_2 - y_1) \frac{dF_s}{dx},$$

$$y_1 = s_k \tau,$$

$$x_n'' = x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1} - \frac{dV}{dx}(x_n) - (y_{n+1} - y_{n-1}) \frac{dF_s}{dx}(x_n),$$

$$\mu y_n'' = \kappa(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) + F_s(x_{n+1}) - F_s(x_{n-1}),$$

$$n = 2, 3, \dots, N-1,$$

$$x_N'' = x_{N-1} - x_N - \frac{dV}{dx}(x_N) - (y_N - y_{N-1}) \frac{dF_s}{dx}(x_N),$$

$$\mu y_N'' = \kappa(y_{N-1} - y_N) - F_s(x_N) - F_s(x_{N-1}) \quad (37)$$

с начальными условиями

$$x_n(0) = x(n), \quad n = 1, 2, \dots, N, \quad y_n(0) = y_{n-1}(0) + \rho_{n-1}(n),$$

$$x'_{n-1}(0) = -s(x_n(0) - x_{n-1}(0)), \quad y'_n(0) = -s(\rho(n) - \rho^0),$$

$$n = 2, 3, \dots, N, \quad x'_N(0) = 0,$$

где $x(\zeta)$, $\rho(\zeta)$ — полученные в континуальном приближении солитонные решения (23), (24), (32), (33), $\rho^0 = \rho_b = 0$ для солитона tb_+ и $\rho^0 = \rho_e$ для солитона te_+ . При $\chi_1 = 0,01$ солитон tb имеет ширину $L = 12,92$, скорость $s = s_{p_1} = 0,406699$; солитон te — $L = 10,26$, $s = s_{p_4} = 0,688594$, что свидетельствует о корректности континуального приближения, использованного при нахождении формы солитона в разделе 2.

Таким образом, при моделировании динамики солитона tb_+ (te_+) на левом конце цепочки будет находиться в метастабильном состоянии me (mb), на правом — в состоянии b (e). Движение солитона вправо со скоростью $s = s_{p_1}$ ($s = s_{p_4}$) будет сопровождаться ростом энергии конечной цепочки за счет вынужденного движения влево левого конца $s_k = s_b$ ($s_k = s_e$), а движение влево со скоростью $s = -s_{p_1}$ ($s = -s_{p_4}$) — уменьшением энергии за счет вынужденного движения левого конца вправо $s_k = -s_b$ ($s_k = -s_e$).

Численное моделирование динамики солитона tb_+ показало его устойчивость. Так, при $s = s_{p_1}$ за время $\tau = 800$ он проходил с постоянной скоростью и сохранением своей формы 326, а при $s = -s_{p_1}$ — 325 звеньев цепи. Моделирование динамики солитона te_+ показало его неустойчивость, проявляющуюся в нарушении согласованности движения подрешеток. При $s = s_{p_4}$ из солитона формируется однокомпонентный кинк, который после образования начинает двигаться в направлении, противоположном начальному (рис. 7), а при $s = -s_{p_4}$ —

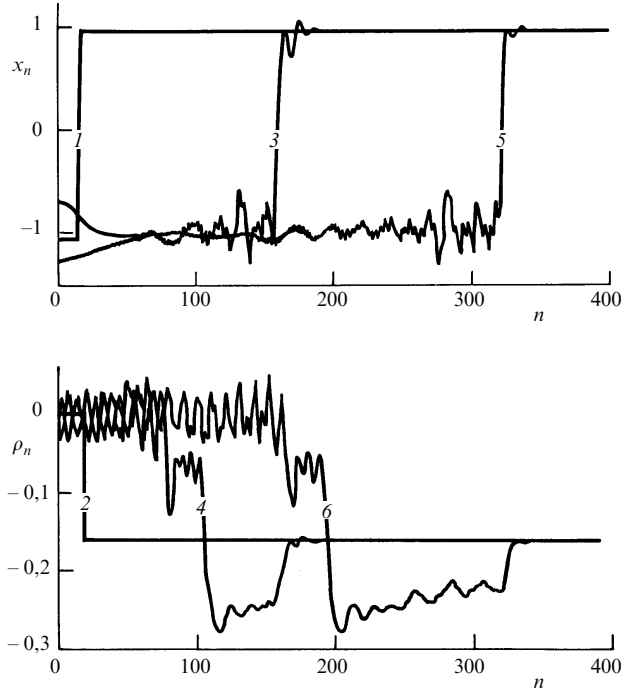


Рис. 9. Конформационный переход $e \rightarrow b$ в цепочке с $g_0 = 0,01$, $g_1 = 0,005$, $\mu = 1$, $\kappa = 0,25$, $\chi_1 = 0,01$, $\chi_2 = 0$. Смещения x_n , ρ_n даны в начальный момент времени $\tau = 0$ (кривые 1, 2), при $\tau = 180$ (кривые 3, 4) и $\tau = 360$ (кривые 5, 6). Скорость движения фронта конформационного перехода $s = 0,92$

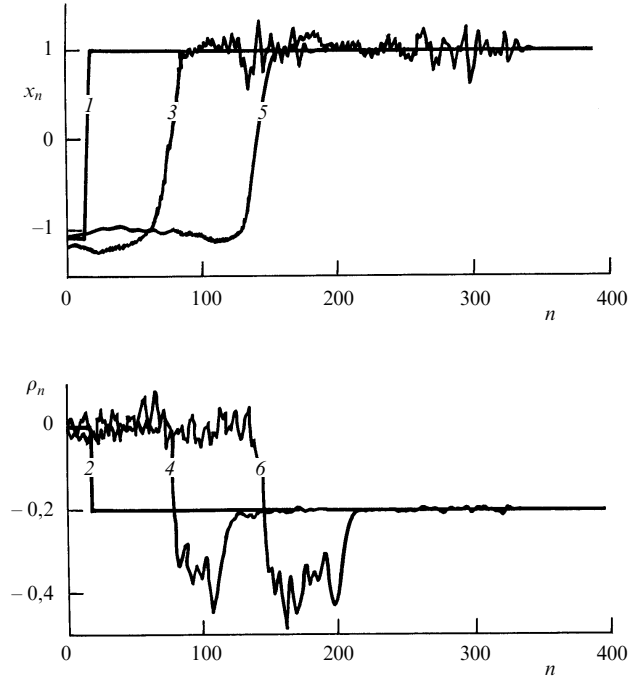


Рис. 10. Конформационный переход $e \rightarrow b$ в цепочке с $g_0 = 0,01$, $g_1 = 0,005$, $\mu = 1$, $\kappa = 0,25$, $\chi_1 = 0,012$, $\chi_2 = 0$. Смещения x_n , ρ_n даны в начальный момент времени $\tau = 0$ (кривые 1, 2), при $\tau = 180$ (кривые 3, 4) и $\tau = 360$ (кривые 5, 6). Скорость движения фронта конформационного перехода $s = 0,38$

однокомпонентный кинк, отрывающийся от солитонной составляющей в направлении первоначального движения (рис. 8).

Рассмотрим переход из метастабильного e -состояния в энергетически более выгодное b -состояние на примере цепи из $N = 400$ звеньев со свободными краями. Пусть первые 15 звеньев находятся в b -состоянии, а все остальные — в e . Тогда динамика цепочки описывается системой уравнений

$$\begin{aligned} x_1'' &= x_2 - x_1 - \frac{dV}{dx}(x_1) - (y_2 - y_1) \frac{dF_s}{dx}(x_1), \\ \mu y_1'' &= \kappa(y_2 - y_1) + F_s(x_1) + F_s(x_2), \\ x_n'' &= x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1} - \frac{dV}{dx}(x_n) - (y_{n+1} - y_{n-1}) \frac{dF_s}{dx}(x_n), \\ \mu y_n'' &= \kappa(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) + F_s(x_{n+1}) - F_s(x_{n-1}), \\ n &= 2, 3, \dots, N-1, \\ x_N'' &= x_{N-1} - x_N - \frac{dV}{dx}(x_N) - (y_N - y_{N-1}) \frac{dF_s}{dx}(x_N), \\ \mu y_N'' &= \kappa(y_{N-1} - y_N) - F_s(x_N) - F_s(x_{N-1}) \end{aligned} \quad (38)$$

с начальными условиями

$$\begin{aligned} x_1(0) &= \dots = x_{14}(0) = \eta_2, & x_{15}(0) &= 0, \\ x_{16}(0) &= \dots = x_N(0) = \xi_1, \\ y_1(0) &= \dots = y_{15}(0) = 0, & y_{n+1}(0) &= y_n(0) + \rho_e, \\ n &= 15, 16, \dots, N-1, \\ x_1'(0) &= \dots = x_N'(0) = 0, & y_1'(0) &= \dots = y_N'(0) = 0. \end{aligned}$$

Полная энергия системы

$$H = \sum_{n=1}^N \left(\frac{1}{2} x_n'^2 + \frac{\mu}{2} y_n'^2 + V(x_n) \right) + \sum_{n=1}^{N-1} \left[\frac{1}{2} (x_{n+1} - x_n)^2 + \right.$$

$$\left. + \frac{\kappa}{2} (y_{n+1} - y_n)^2 + (y_{n+1} - y_n) F_s(x_n) + (y_{n+1} - y_n) F_s(x_{n+1}) \right] \quad (39)$$

является интегралом движения, который удобно использовать для контроля точности численного интегрирования.

Численное интегрирование системы уравнений (38) показало, что конформационный переход может происходить по двум сценариям.

При слабом взаимодействии подрешеток (при $\chi_1 < \chi_{p3}$) переход разделяется на две стадии: в цепочке образуется однокомпонентный кинк, движущийся со сверхзвуковой скоростью $s > s_2$, без растяжения внешней подрешетки, за ним со скоростью звука s_2 идет волна растяжения внешней подрешетки (рис. 9). В зависимости от величины параметра взаимодействия подрешеток χ_1 основное выделение энергии может происходить как на первой, так и на второй стадиях рассматриваемого экзотермического процесса. Первая стадия соответствует движению сверхзвуковой волны реакции и не сопровождается увеличением линейных размеров молекулярной системы. При этом топологический солитон te аппроксимирует форму фронта сверхзвуковой волны. Вторая стадия сопровождается расширением и активной термализацией внешней подрешетки достаточно далеко за фронтом.

При сильном взаимодействии подрешеток (при $\chi_1 > \chi_{p3}$), когда не существует топологический солитон te , конформационный переход не разделяется на две стадии. В цепочке образуется дозвуковой двухкомпонентный солитон ($s < s_2$), сразу переводящий цепочку из e - в b -состояние (рис. 10). Выделение энергии при этом происходит в области локализации солитона.

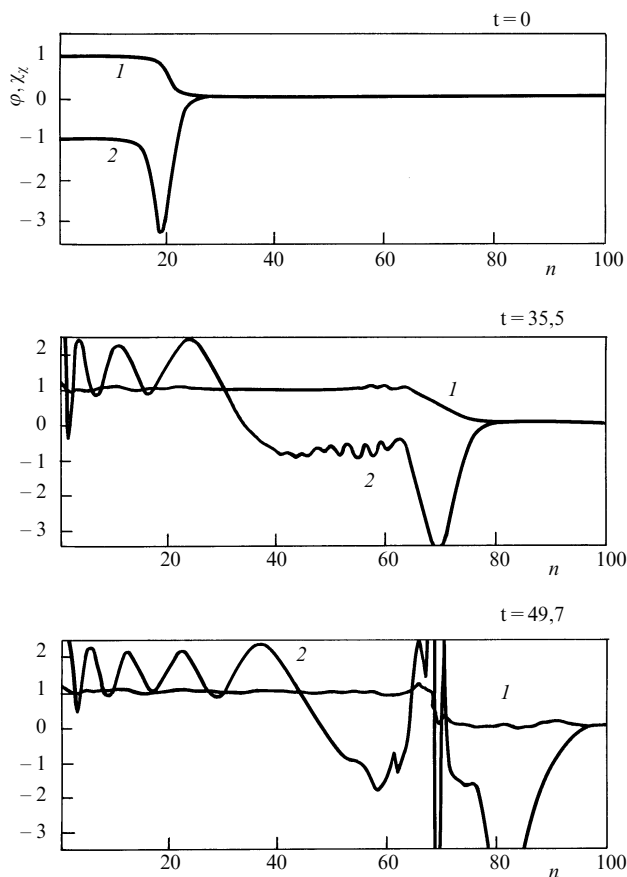


Рис. 11. Эволюция топологического солитона в двухатомной цепи со свободными краями ($g_0 = 0,014$, $g_1 = 0,011$, $\mu = 5$, $\chi_{1,s} = 0,026$, $\chi_{1,a} = 0,634$, $s_2 = 0,155$). Начальная скорость солитона $s = 0,246$ (1 — внутренняя координата x_n , 2 — внешняя координата ρ_n)

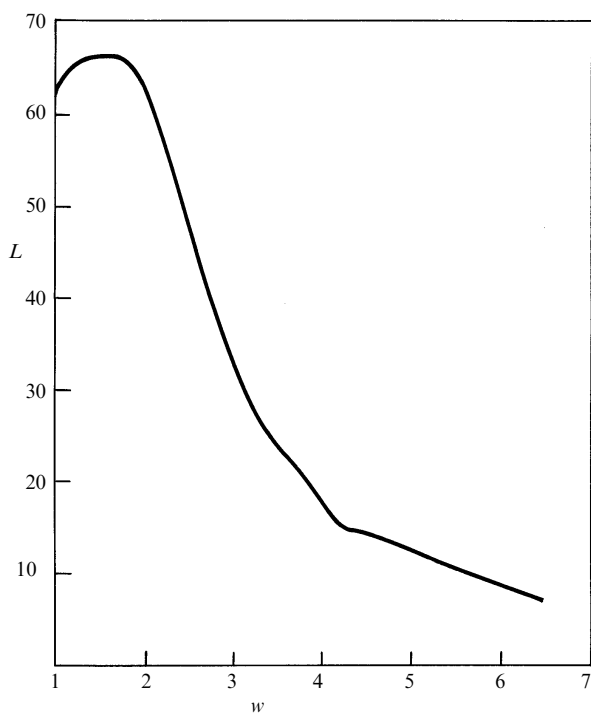


Рис. 12. Зависимость длины пробега **te**-солитона от ширины его профиля

Полученный механизм перехода соответствует динамическому режиму распространения экзотермической реакции [27]. Первый сценарий с нетермализованной сверхзвуковой детонационной волной можно связать с взрывообразным протеканием реакции, при котором выделение энергии происходит за фронтом реакции. Второй — с плавным горением, когда энергия выделяется в области фронта реакции.

Рассмотрим теперь динамику топологических солитонов для таких параметров цепи, когда $\chi_{1,a} \neq 0$. В этом случае топологические **te**-солитоны могут существовать как при $\delta = +1$, так и при $\delta = -1$. При этом они имеют сверхзвуковую скорость $s_{te} = s_{ps} > s_2$. Численное моделирование динамики солитона **te** показало, что существует ряд особенностей по сравнению со случаями, рассмотренными выше. Солитон **te** также неустойчив, но его распад происходит по другому сценарию. Сверхзвуковые **te**-солитоны имеют конечное время жизни, зависящее от значений параметров решетки. При моделировании динамики **te**-солитона в цепи со свободными концами отчетливо прослеживаются несколько стадий его эволюции (рис. 11). Первая характеризуется отсутствием торможения, причем скорость фронта практически совпадает с расчетной. На этой стадии происходит формирование постфронтальной области, где промежуточное динамическое состояние, соответствующее метастабильной конформации **mb**, релаксирует к конечному состоянию — колебаниям около равновесной конфигурации продуктов (**b**-состояние). Дальнейшая эволюция солитона связана с излучением, переносящим энергию собственно фронтальной области в область, занятую молекулами в промежуточном состоянии. Эта стадия характеризуется слабым торможением солитона и искажением профиля в области промежуточного состояния, следующей непосредственно за фронтом. И, наконец, последняя стадия начинается с резкого торможения фронта и завершается полной остановкой и формированием отчетливо выраженной границы, отделяющей реагенты от продуктов реакции. При этом процесс формирования границы раздела проходит сначала через стадию образования протяженной переходной области, которая впоследствии разрушается. Полный пробег **te**-солитона составляет 20–100 элементарных ячеек в зависимости от параметров решетки. Подобный сценарий остановки фронта реакции оказывается аналогичным торможению и остановке спиновального распада в смесях полимеров, наблюдающимся на совершенно иных пространственном и временном масштабах [28].

Другой неожиданной особенностью рассматриваемого случая является необычная зависимость времени жизни (пробега) **te**-солитона от его ширины (или, что эквивалентно, скорости). Традиционно считается, что увеличение ширины топологического солитона приводит к уменьшению влияния дискретности решетки, а соответственно, и увеличению времени жизни. Однако в рассматриваемой системе зависимость времени жизни от ширины оказалась обратной (рис. 12). А именно, очень широкие солитоны, скорость которых близка к скорости звука, s_2 разрушаются практически сразу так, что определить их пробег не представляется возможным. По мере увеличения скорости кинка (и уменьшения его ширины) длина его пробега увеличивается, достигая максимального значения $N_t = 65$ элементарных ячеек при $s_{te} \approx 1,8s_2$. Правее максимального значения наблюда-

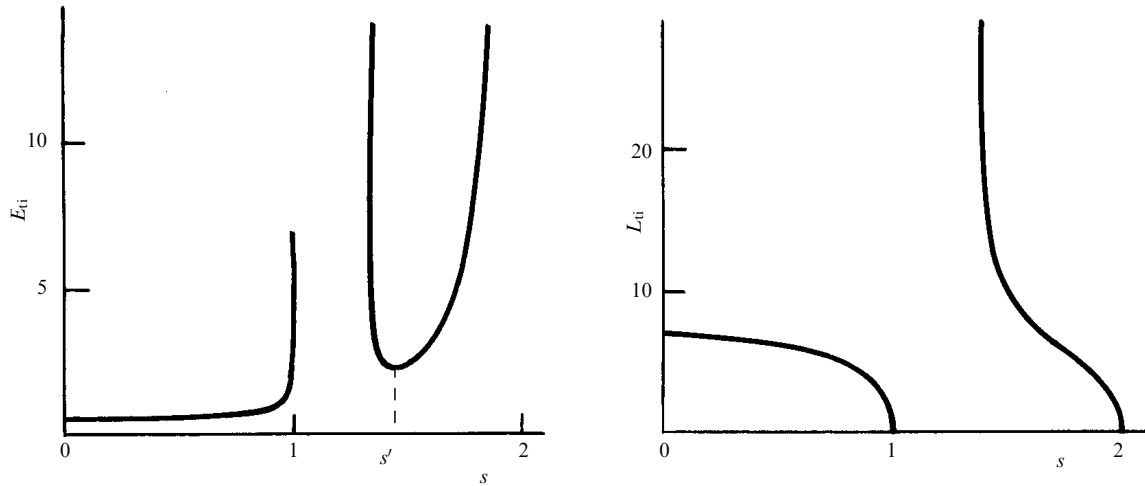


Рис. 13. Зависимость энергии E_{ii} и ширины L_{ii} (в периодах цепочки) топологического солитона \mathbf{ti} от скорости s при $g_0 = 0, 1, g_1 = 0, \mu = 1, \kappa = 4, s_2 = 2, \chi_1 = 0, \chi_2 = 0, 33$ ($s_{p_2} = 1, 34981$)

ется небольшое падение длины пробега солитона. Такой характер зависимости времени жизни топологического солитона можно объяснить конкуренцией двух механизмов. Разрушение широких ("медленных") солитонов связано с длинноволновой неустойчивостью, тогда как для узких ("быстрых") определяющими являются эффекты дискретности.

Численное исследование динамики солитонов в цепочке с $\chi_{1,\pm} = 0, \chi_{2,\pm} = \chi_2, \delta = +1$ было проведено в работе [12]. При таком взаимодействии подрешеток в бистабильной невырожденной цепочке могут существовать только нетопологические солитоны, а в вырожденной ($g_1 = 0$) — только топологические солитоны \mathbf{ti}_{\pm} , описывающие переход цепочки из одного эквивалентного состояния в другое.

Вырожденная цепочка ($g_1 = 0$) при выполнении условия бистабильности $\chi_2 < \sqrt{\kappa g_0}/2$ имеет два эквивалентных устойчивых однородных состояния $\{x_n = \pm 1, y_{n+1} - y_n = 0\}$ ($\pm i$ -состояния). При предельном переходе $g_1 \rightarrow 0$ состояние \mathbf{b} переходит в состояние $-\mathbf{i}$, а состояние \mathbf{e} — в $+\mathbf{i}$. Солитонное решение системы уравнений (10), (11) должно иметь асимптотику

$$x \rightarrow \pm 1 (\mp 1), \quad y_{\zeta} \rightarrow 0, \quad \zeta \rightarrow \pm \infty,$$

при которой эффективный потенциал нелинейного осциллятора (13) имеет вид $Q(x) = a(1 - x^2)^2$. Поэтому только при $a = g_0\{1 + [2\chi_2/g\mu(s^2 - s_2^2)]\}(s^2 - 1)^{-1} < 0$ система уравнений (10), (11) будет иметь решения

$$\begin{aligned} x_{\mathbf{ti}_{\pm}}(\zeta) &= \pm \tanh(\sqrt{-2a}\zeta), \\ \rho_{\mathbf{ti}_{\pm}}(\zeta) &= 2\chi_2[\mu(s^2 - s_2^2) \cosh^2(\sqrt{-2a}\zeta)]^{-1}, \end{aligned} \quad (40)$$

которые соответствуют топологическим солитонам \mathbf{ti}_{\pm} , описывающим локализованный переход из одного стационарного состояния ($\mp \mathbf{i}$) в другое ($\pm \mathbf{i}$).

Для существования топологических солитонов \mathbf{ti}_{\pm} необходимо выполнение неравенства $a < 0$, которое определяет спектр допустимых скоростей: $0 \leq s < s_{p_2}$, $s_2 < s < 1$ при $s_2 < 1$ и $0 \leq s < \min(1, s_{p_2})$, $\max(1, s_{p_2}) < s < s_2$ при $s_2 > 1$. Заметим, что в силу условия бистабильности $s_{p_2} > 0$, поэтому солитоны \mathbf{ti}_{\pm} всегда будут иметь спектр скоростей, состоящий из двух зон, разделенных щелью шириной $s_2 - s_{p_2}$ при $s_2 < 1$ и шириной $|s_{p_2} - 1|$ при $s_2 > 1$. При $s_2 > 1$ в области

локализации солитона происходит сжатие внешней подрешетки, а при $s_2 < 1$ в нижней зоне скоростей — сжатие, в верхней — растяжение.

Топологический солитон характеризуется шириной

$$L_{ii} = 2(x_{\zeta}(0))^{-1} = \sqrt{2(1 - s^2)(s^2 - s_2^2)[g_0(s^2 - s_{p_2}^2)]^{-1}}$$

и энергией

$$\begin{aligned} E_{ii} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{2}{1 - s^2} V(x_{\pm i}(\zeta)) - \frac{4(s^4 - 2s^2 + s_2^2)F_s^2(x_{\pm i}(\zeta))}{\mu(s^2 - s_2^2)^2(1 - s^2)} \right] d\zeta = \\ &= \frac{4}{3} \sqrt{\frac{2g_0(1 - s^2)}{(s^2 - s_{p_2}^2)(s^2 - s_2^2)^3}} \times \\ &\times \frac{(s^2 - s_2^2)^2 - (s_2^2 - s_{p_2}^2)(s^4 - 2s^2 + s_2^2)}{1 - s^2}. \end{aligned}$$

Зависимости E_{ii} и L_{ii} от s при $s_2 > 1$ приведены на рис. 13, а при $s_2 < 1$ — на рис. 14. Заметим, что для $s \rightarrow \max(1, s_{p_2})$ при $s_2 > 1$ и для $s \rightarrow s_{p_2}$ при $s_2 < 1$ ширина солитона $L_{ii} \rightarrow \infty$, поэтому для этих значений скоростей дискретная система уравнений (6), (7) всегда будет иметь гладкие солитонные решения. Энергия солитона в первой зоне спектра скоростей монотонно растет, а внутри второй зоны энергия имеет минимум при скорости $s = s'$.

Устойчивость топологических солитонов \mathbf{ti}_{\pm} при скоростях из нижней зоны спектра доказана аналитически в работах [7, 25]. Проведенное в работе [7] численное исследование устойчивости показало, что в верхней зоне спектра солитоны устойчивы при $s > s'$ и неустойчивы при $s < s'$. Это позволяет сделать вывод, что топологические солитоны \mathbf{ti}_{\pm} устойчивы только при тех значениях скоростей, где $dE_{ii}/ds > 0$.

При $g_1 > 0$ условие бистабильности (5) будет иметь вид

$$\chi_2 < \chi_{p_3} = \sqrt{\frac{1}{2} \kappa g_0 \left[1 - \frac{4(\xi_1^2 - 1)}{\xi_1} \right]},$$

а предельные значения скоростей

$$s_{p_1} = s_{p_2} = s_2 \sqrt{1 - \frac{2\chi_2^2}{g_0\kappa}} < s_{p_3} = s_2 \sqrt{1 - \frac{4\chi_2^2 \xi_1^2}{g_0\kappa(3\xi_1^2 - 1)}}.$$

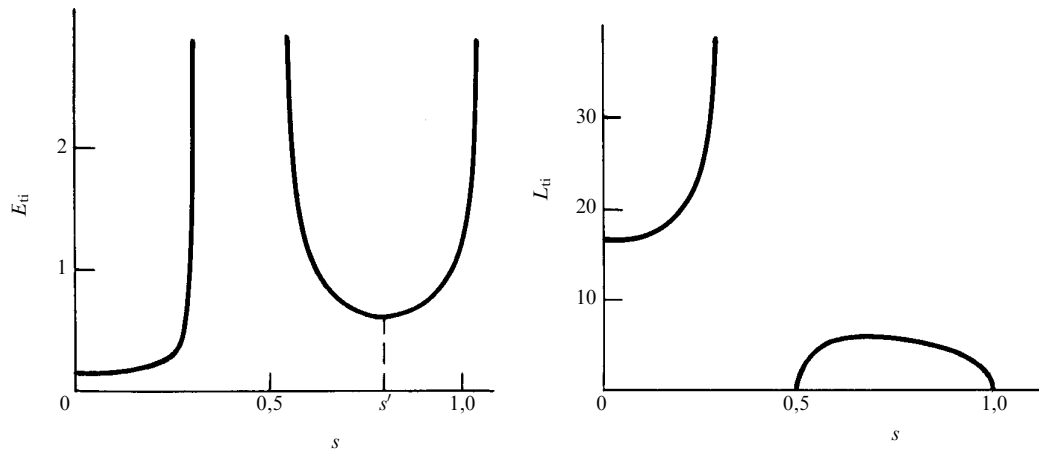


Рис. 14. Зависимость энергии $E_{\mathbf{ti}}$ и ширины $L_{\mathbf{ti}}$ (в периодах цепочки) топологического солитона \mathbf{ti} от скорости s при $g_0 = 0,02$, $g_1 = 0$, $\mu = 1$, $\kappa = 0,25$, $s_2 = 0,5$, $\chi_1 = 0$, $\chi_2 = 0,04$ ($s_{p_2} = 0,3$)

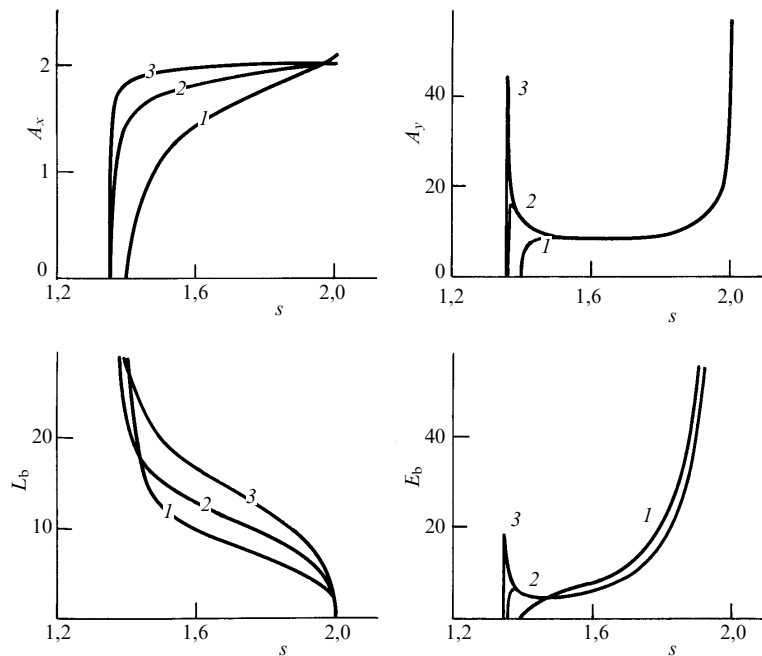


Рис. 15. Зависимость амплитуд A_x , A_y , ширины L_b , данной в периодах цепочки, и энергии E , отсчитываемой от уровня энергии конформации \mathbf{b} , солитона \mathbf{b}_1 от скорости s при $g_0 = 0$, $1, \mu = 1$, $\kappa = 4$, $\chi_1 = 0$, $\chi_2 = 0,33$, $g_1 = 0,05$ ($s_{p_3} = 1,389727$, кривая 1), $g_1 = 0,005$ ($s_{p_3} = 1,354726$, кривая 2) и $g_1 = 0,0005$ ($s_{p_3} = 1,350318$, кривая 3)

Солитон \mathbf{b}_1 будет иметь однозонный спектр скоростей $\max(1, s_{p_3}) < s < s_2$, а солитоны \mathbf{b}_2 , \mathbf{b}_3 — однозонный спектр $\min(1, s_{p_2}) < s < \min(1, s_{p_3})$. Поэтому необходимым условием существования солитона \mathbf{b}_1 является выполнение неравенства $s_2 > 1$, а необходимым условием существования солитонов \mathbf{b}_2 , \mathbf{b}_3 — выполнение неравенства $s_{p_2} < 1$.

Зависимости амплитуд A_x , A_y , ширины L_b и энергии E_b , отсчитываемой от уровня энергии \mathbf{b} -состояния, солитона \mathbf{b}_1 от его скорости s показаны на рис. 15. Энергия солитона \mathbf{b}_1 является монотонной функцией от s только для достаточно больших значений параметра несимметричности g_1 . Для малых значений g_1 функция $E_b(s)$ имеет локальный минимум. При $g_1 \rightarrow 0$ ширина солитона \mathbf{b}_1 монотонно растет и в пределе он распадается на два топологических солитона \mathbf{ti}_+ , \mathbf{ti}_- (рис. 16). Интервал скоростей солитона \mathbf{b}_1 при этом переходит в верхнюю зону спектра скоростей топологического солитона.

Численное исследование динамики солитона \mathbf{b}_1 показало, что он устойчив только при тех значениях скорости s , где $dE_b/ds > 0$.

Спектр скоростей солитона \mathbf{e}_1 определяется из системы неравенств (27). В цепочке с $d = \eta_2^2 - 1 + [2\chi_2 F_s(\eta_2)/\kappa g_0] < 0$ спектр будет состоять из двух зон $0 \leq s < \min(1, s_{p_8})$, $s_2 < s < 1$, при $s_2 < 1$ и одной зоны $0 \leq s < \min(1, s_{p_8})$ при $s_2 > 1$, где

$$s_{p_8} = s_2 \sqrt{1 - \frac{2\chi_2^2}{\kappa g_0 [1 + (d/2\eta_2^2)]}}.$$

В цепочке с $d > 0$ солитон может существовать только при $s_2 > 1$, когда он имеет однозонный спектр скоростей $\max(1, s_{p_8}) < s < s_2$. Спектр скоростей солитонов \mathbf{e}_2 , \mathbf{e}_3 определяется из системы неравенств (28). При $d < 0$ он состоит из интервала $\max(1, s_{p_8}) \leq s < s_{p_2}$, а при $d > 0$ —

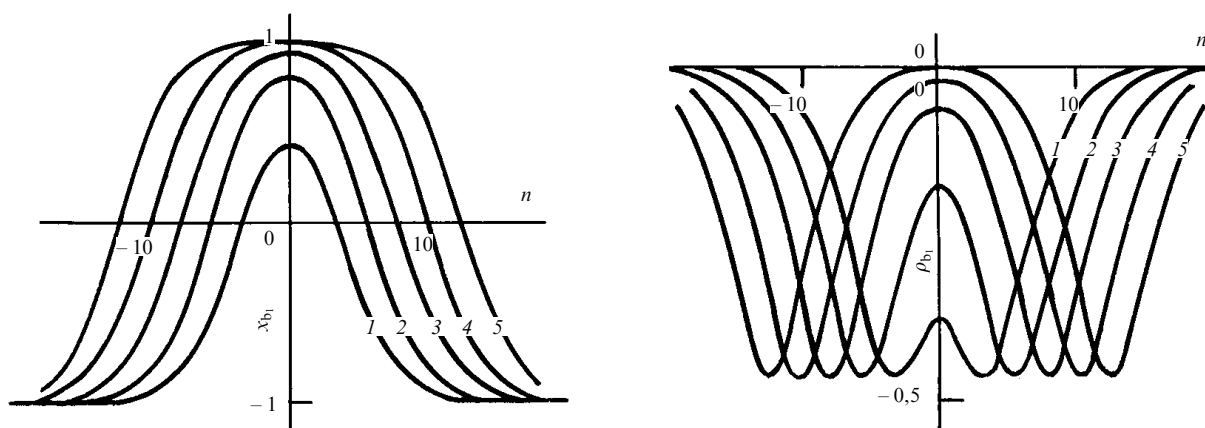


Рис. 16. Переход солитона b_1 в пару топологических солитонов ti_+ , ti_- при $g_1 \rightarrow 0$, $g_0 = 0, 1$, $\mu = 1$, $\kappa = 4$, $\chi_1 = 0$, $\chi_2 = 0,33$, $s = 1,6$. Графики солитона b_1 даны при $g_1 = 0, 0,05, 0,005, 0,0005, 0,00005$ и $0,000005$ (кривые 1–5)

из интервала $s_{p_2} < s < \min(1, s_{p_8})$. Численное моделирование динамики e -солитонов показало их неустойчивость при всех значениях скоростей.

4. Заключение

В настоящей работе проведена полная классификация локализованных нелинейных возбуждений в широком классе бистабильных энергетически невырожденных систем. Один из выводов, вытекающий из анализа полученных результатов — существование кооперативного элементарного механизма структурных переходов и химических реакций в бистабильных энергетически невырожденных системах. Этот механизм реализуется топологическими солитонами нового типа, которые в отличие от обычных топологических солитонов имеют единственное возможное значение скорости движения, переводят область за фронтом волны в промежуточное динамическое состояние, причем последующая релаксация к конечному состоянию происходит достаточно далеко за фронтом и практически не влияет на его динамику. Показано, что столь различные с физической точки зрения процессы, как структурные переходы и химические реакции в молекулярных кристаллах, перенос протонов в решетках с водородными связями, конформационные переходы в ДНК, могут быть описаны с использованием различных конкретных реализаций общего гамильтониана (1). Поэтому полученные выводы в равной степени относятся к широкому классу бистабильных систем и позволяют объяснить целый ряд "аномалий", обнаруженных при натуральных и компьютерных экспериментах [27].

Анализ рассматриваемых в настоящей статье моделей, основанный на линеаризации уравнения, связанного с одной из компонент системы (деформация "внешней подрешетки" согласно терминологии), является существенным этапом в разработке реалистичных моделей динамики сложных молекулярных систем. На этом этапе оказывается возможным аналитическое исследование солитонных решений уравнений движения, благодаря чему удастся выявить характер элементарных возбуждений в сложных энергетически невырожденных системах. Таким образом, создается основа для более детального изучения нелинейной динамики, термодинамики и кинетики конкретных систем.

Одним из возможных направлений дальнейших исследований является построение моделей твердофазных реакций диссоциативного типа (подобных диссоциации твердых ВВ), что требует учета ангармонизма межмолекулярных взаимодействий и анализа поведения солитоноподобных решений в том случае, когда минимум энергии, соответствующий конечному состоянию, сдвинут на бесконечность.

Особую важность имеет вопрос об инициировании солитонных возбуждений в реальных системах. Наиболее естественным представляется локальное инициирование солитонов. В то же время предварительные исследования показали, что инициирование кинк-антикинковой пары тепловыми флуктуациями также возможно. Из полученных результатов следует, что в случае экзотермических реакций или структурных переходов соответствующее солитонное решение оказывается неустойчивым и обладает конечным временем жизни. Здесь особенно важным представляется вопрос о влиянии ангармонизма межмолекулярного взаимодействия на динамику солитонов.

Отметим в заключение, что возбуждения солитонного типа, подобные рассмотренным в настоящей работе, могут существовать во многих других физических системах.

Двое из авторов (Л.И. Маневич и В.В. Смирнов) благодарят Российский фонд фундаментальных исследований за финансовую поддержку исследований. С.Н. Волков благодарит ГКНТ Украины за частичную поддержку исследований.

5. Приложение

5.1. Экзотермические реакции в молекулярном двухатомном кристалле. Детонация твердых взрывчатых веществ

В течение долгого времени распространение ударных волн в химически активных средах остается предметом пристального внимания исследователей различных специальностей как физиков, так и химиков. С одной стороны широко развиваются аналитические и экспериментальные методы, основанные на макроскопическом подходе к явлению распространения детонационной волны (ДВ) [17–20], а с другой ведутся активные исследо-

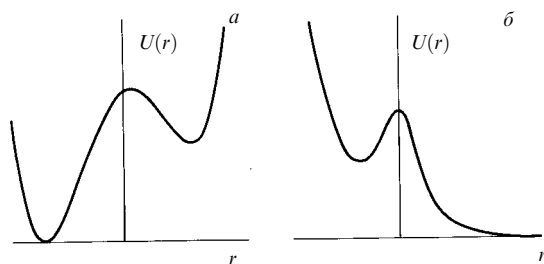


Рис. 17. Качественный вид внутримолекулярного потенциала $U(r)$ при структурном переходе (а) и при диссоциации молекул цепочки (б)

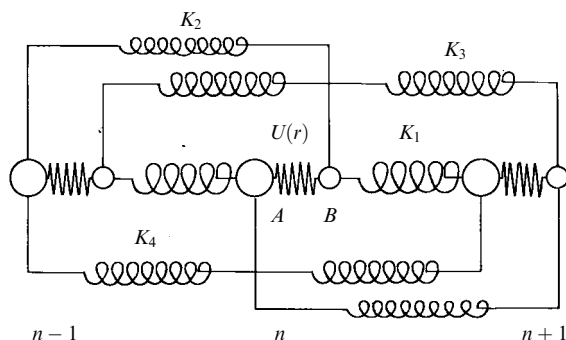


Рис. 18. Схематическая модель двухатомной молекулярной цепи

вания в области молекулярного строения и возможных путей реакции взрывчатых веществ (ВВ) [21–24]. Однако до настоящего времени в указанной области остается множество нерешенных проблем. В последнее время был проведен ряд исследований, которые по сути могут служить соединяющим звеном между макроскопическим подходом к явлению распространения высокоэнергетических процессов в конденсированной фазе и молекулярными моделями химически активных сред. Речь идет о методах молекулярно-динамического (МД) моделирования в приложении к распространению ударных и детонационных волн как в газовых, так и в конденсированных средах [13–15, 25–29]. Действительно, процессы физико-химических превращений, происходящие в области фронта ударной волны (УВ) протекают за времена, сравнимые со временем межмолекулярных колебаний ($\leq 10^{-12}$ с), и локализованы в областях порядка нескольких межатомных расстояний ($\leq 10^{-9}$ м). Поэтому указанные процессы являются идеальным объектом для исследования методом МД с точки зрения временного и пространственного разрешения. Однако, как уже отмечалось во введении, построение аналитически разрешимой модели необходимо для однозначной трактовки численных экспериментов.

Рассмотрим квазиодномерную модель двухатомного кристалла, предложенную в работе [20]. Пусть одномерная цепочка состоит из чередующихся частиц двух типов А и В. Для определенности будем считать $m_A \leq m_B$, где m_A и m_B — массы молекул А и В. Молекулярная цепочка образуется при последовательном соединении двухатомных молекул АВ за счет межмолекулярных взаимодействий. Качественный вид внутримолекулярного потенциала U показан на рис. 17. Межмолекулярные взаимодействия атомов описываются гармоническими потенциалами, что оправдано тем, что на фронте ударной волны происходит сжатие

цепочки, и молекулы взаимодействуют только посредством отталкивания. При сжатии гармонический потенциал физически эквивалентен реально действующему, имеющему положительную кривизну в этом диапазоне значений.

Пусть в начальном состоянии цепочка имеет шаг l и равновесную длину внутримолекулярных связей r_0 . Гамильтониан цепочки будет иметь вид

$$E = \sum_n \left[\frac{1}{2} m_A \dot{z}_{A_n}^2 + \frac{1}{2} m_B \dot{z}_{B_n}^2 + U(z_{B_n} - z_{A_n}) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} K_1 (z_{A_n} - z_{B_{n-1}} - l + r_0)^2 + \frac{1}{2} K_2 (z_{B_{n+1}} - z_{A_n} - l - r_0)^2 + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} K_3 (z_{B_{n+1}} - z_{B_n} - l)^2 + \frac{1}{2} K_4 (z_{A_{n+1}} - z_{A_n} - l)^2 \right], \quad (41)$$

где z_{A_n} и z_{B_n} — координаты n -х частиц цепочки A_n и B_n , $U(z)$ — потенциал внутримолекулярного взаимодействия, имеющий минимум при $z = r_0$, K_1, K_2, K_3, K_4 — жесткости межмолекулярных взаимодействий, а точка обозначает дифференцирование по безразмерному времени t . Схематическая модель решетки приведена на рис. 18.

Перейдем от абсолютных координат к относительным смещениям $u_{A_n} = z_{A_n} - nl + r_0 - u_1$, $u_{B_n} = z_{B_n} - nl$. Тогда гамильтониан (41) принимает вид¹

$$E = \sum_n \left[\frac{1}{2} m_A \dot{u}_{A_n}^2 + \frac{1}{2} m_B \dot{u}_{B_n}^2 + \Phi(u_{B_n} - u_{A_n}) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} K_1 (u_{A_n} - u_{B_{n-1}} + u_1)^2 + \frac{1}{2} K_2 (u_{B_{n+1}} - u_{A_n} - u_1)^2 + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} K_3 (u_{B_{n+1}} - u_{B_n})^2 + \frac{1}{2} K_4 (u_{A_{n+1}} - u_{A_n})^2 \right], \quad (42)$$

где внутримолекулярный потенциал $\Phi(r) = U(r + r_0 - u_1)$.

Для моделирования структурной перестройки цепочки удобно использовать потенциал Φ с линейной несимметричностью:

$$\Phi(u) = \varepsilon_0 [(u u_0^{-1})^2 - 1]^2 + \varepsilon_1 u u_0^{-1} + \varepsilon_2, \quad (43)$$

где параметр $\varepsilon_0 > 0$ характеризует высоту, а $u_0 > 0$ — ширину энергетического барьера между двумя устойчивыми состояниями молекулы. Параметр $\varepsilon_1 > 0$ характеризует разность энергий основных состояний. При $\varepsilon_1 = 0$ потенциал (43) будет двухъямным симметричным потенциалом с минимумами $\pm u_0$ и барьером ε_0 , а при $0 < \varepsilon_1 < 8\varepsilon_0/\sqrt{27}$ — несимметричным двухъямным потенциалом с минимумом u_1 , соответствующим начальному состоянию цепочки. Параметр ε_2 (уровень отсчета энергии) выберем из условия $\Phi(u_1) = 0$, т. е. возьмем $\varepsilon_2 = -\varepsilon_0 [1 - (u_1 u_0^{-1})^2]^2 - \varepsilon_1 u_1 u_0^{-1}$.

Введем переменные, характеризующие движение молекулы как целого: смещение центра масс

¹ В работе [20] была использована другая форма записи гамильтониана (41), а асимметрия потенциала $\Phi(u)$ обеспечивалась слагаемым, пропорциональным u^3 . Однако несложно показать, что эти формулировки эквивалентны.

$R_n = (m_A u_{A_n} + m_B u_{B_n})/M$, где полная масса молекулы $M = m_A + m_B$, и внутримолекулярное смещение (координату реакции) $r_n = u_{B_n} - u_{A_n}$. Тогда

$$u_{A_n} = R_n - m_B r_n M^{-1}, \quad u_{B_n} = R_n - m_A r_n M^{-1}.$$

Используя эти выражения, гамильтониан (42) при помощи элементарных выкладок можно преобразовать к виду

$$E = \sum_n \left[\frac{1}{2} M \dot{R}_n^2 + \frac{1}{2} m r_n^2 + \Phi_1(r_n) + \frac{1}{2} k (r_{n+1} - r_n)^2 + \frac{1}{2} K (R_{n+1} - R_n)^2 + (r_n - u_1) \times \right. \\ \left. \times [X_+(R_{n+1} - R_n) + X_-(R_n - R_{n-1})] \right], \quad (44)$$

где $m = m_A m_B / M$ — приведенная масса молекулы цепочки, $\Phi_1(r) = \Phi(r) + [(K_1 + K_2)(r - u_1)^2 / 2]$ — приведенный внутримолекулярный потенциал, $k = [K_3 m_A^2 + K_4 m_B^2 - m_A m_B (K_1 + K_2)] / M^2$, $K = K_1 + K_2 + K_3 + K_4$, $X_+ = [m_B (K_2 + K_4) - m_A (K_1 + K_3)] / M$, $X_- = [m_A (K_2 + K_3) - m_B (K_1 + K_4)] / M$.

Гамильтониан (44), являющийся частным случаем обобщенного гамильтониана (1), позволяет рассмотреть двухатомную цепочку как систему, состоящую из двух взаимодействующих подрешеток: внутримолекулярной (внутренней) подрешетки с относительными смещениями узлов r_n , массой узла m и жесткостью k и внешней подрешетки, описывающей движение молекул, с относительными смещениями узлов R_n , массой узла $M \geq m$ и жесткостью K . Параметры X_+ , X_- характеризуют взаимодействие подрешеток. Заметим, что в отличие от традиционно рассматриваемых двухмассовых решеток (см., например [21]), параметр k , определяющий наклон оптической ветви дисперсионного соотношения, может быть как меньше, так и больше нуля.

В данной модели топологический **те**-солитон соответствует движению фронта реакции, тогда как нетопологические **е**-солитоны могут формировать сложную структуру фронта при ударном инициировании детонации. Поскольку скорости нетопологических солитонов выше скорости топологического, именно они образуют видимый край фронта детонационной волны. Подобный механизм позволяет объяснить результаты компьютерных экспериментов [17–19], в частности, понять, почему в работе [17] стационарное движение фронта ДВ наблюдалось только при введении диссипативного слагаемого в уравнения движения. Можно показать, что в рассматриваемой в [17] модели твердого ВВ в длинноволновом гамильтониане отсутствует слагаемое $\rho_x F(x)$, определяющее существование топологических солитонов, подобных **те**-солитонам и ответственных за солитонный механизм распространения детонационного фронта. С другой стороны, в работах [18,19] использовалась модель элементарной ячейки, допускающая существование как **те**-, так и **е**-солитонов, что приводит к существованию стационарного фронта детонационной волны. Что касается вопросов, связанных с устойчивостью **те**-солитонов, то предварительные результаты компьютерного моделирования показывают, что учет даже слабой нелинейности в потенциале приводит к существенному увеличению времени жизни реакционного кинка. И, наконец, последнее замечание следует сделать в связи с

формой внутримолекулярного потенциала. При моделировании распространения ДВ использовался потенциал диссоциативного типа (см. рис. 17), для которого минимум, соответствующий продуктам реакции, сдвинут на бесконечность. В настоящей же работе использовался двухъямный потенциал, в котором равновесные состояния, соответствующие реагентам и продуктам реакции, разделены конечным расстоянием. Однако эффективные потенциалы Q в уравнении (13) как в первом, так и во втором случаях качественно эквивалентны, т.е. имеют два минимума, разделенные конечным расстоянием [20]. Таким образом, изменение потенциала от двухъямного до диссоциативного не приводит к принципиальному изменению в механизме распространения реакции. Важнейшим элементом рассматриваемых моделей является наличие релаксации промежуточного состояния к конечному состоянию продуктов. Такой процесс не описывается в рамках рассматриваемой аналитической модели, однако отчетливо проявляется при численном моделировании. Это означает, что аналитическое решение соответствует промежуточной асимптотике процесса, описывая только фронтальную область.

5.2. Динамика локальных переходов в макромолекулах ДНК

Биологические макромолекулы обладают высоким полиморфизмом вторичной структуры. Относительно небольшие барьеры, разделяющие устойчивые состояния, и малые разности свободной энергии возможных структурных форм позволяют макромолекулам клетки изменять в широких пределах взаимное расположение своих структурных элементов (конформацию), что одновременно обеспечивает как надежное сбережение генетической информации, так и ее передачу. Наиболее яркие полиморфные свойства имеют макромолекулы ДНК [29]. При физиологических условиях они находятся в В-конформации двойной спирали, но на локальных участках могут переходить в А-, С-, D-, Z- и другие конформации [30]. Считается, что именно переходы в метастабильные состояния обуславливают высокую реакционную способность биологических макромолекул [31, 32]. Исследование динамики локализованных возбуждений (конформационных солитонов) позволило бы дать интерпретацию экспериментальным данным по эффектам дальнего действия в биологических системах и выйти на новый уровень понимания механизмов регуляции биологической активности клетки. Определенный прогресс в этом направлении достигнут при изучении В–А-переходов в макромолекулах ДНК [13–16].

В общем случае модель макромолекулы типа ДНК представляет собой двойную цепь бистабильных элементов, что соответствует наличию двух наиболее выгодных форм сахарного кольца двух нуклеозида [16, 33]. Для описания подвижности мономерного звена цепи достаточно использовать элементарную ячейку, содержащую четыре компонента, две из которых соответствуют нуклеозидам, а две — фосфатным группам остова [16]. Расположение этих компонент двойной спирали ДНК определяет параметры модели, которые рассчитывают по известным рентгеноструктурным данным. Массы остова (m_0) гомогенны вдоль всей цепи макромолекулы, а массы нуклеозидов (m_i) различны, так как включают массы нуклеиновых оснований. Здесь индекс $i = 1, 2$ нумерует цепи макромолекулы. Энергия макромолекулы в при-

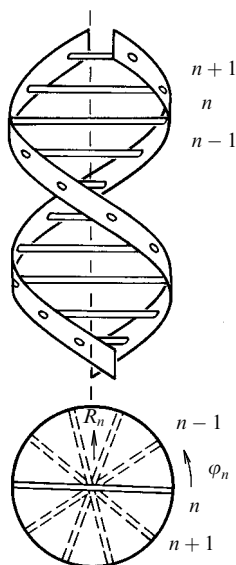


Рис. 19. Двухкомпонентная модель конформационной подвижности двуспиральной молекулы ДНК

ближении четырехкомпонентной модели имеет вид

$$E = \frac{1}{2} \sum_{n,i} [m_0 \dot{\mathbf{R}}_i^2(n) + m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2(n) + U(\mathbf{r}_i(n), \mathbf{R}_i(n))], \quad (45)$$

где суммирование по n включает все мономеры цепи; радиус-векторы \mathbf{R}_i и \mathbf{r}_i описывают смещения центров масс остова и нуклеозидов, соответственно, U — потенциальная энергия, зависящая от координат конформационных смещений. В линейном приближении данная модель (45) позволяет качественно и количественно охарактеризовать колебания структурных элементов ДНК и дать интерпретацию низкочастотным спектрам комбинационного рассеяния [34].

Описанная модель конформационной подвижности ДНК достаточно сложна, однако при изучении динамики конкретных конформационных переходов, таких как $B \rightarrow A$, ее удается свести к двухкомпонентной модели [16]. В этом случае учитывается, что конформационный переход происходит одновременно в обоих тяжах двойной цепи макромолекулы. При этом нуклеиновые основания перемещаются совместно в связанных парах без существенного изменения длин водородных связей. В процессе перехода $B \rightarrow A$ меняется форма сахарного кольца и нуклеозида в целом. Одновременно с изменениями геометрии мономерного звена происходит кручение и изгиб остова макромолекулы. Учитывая вышесказанное, в четырехкомпонентной модели может быть сделан переход к описанию совместных движений структурных элементов в тяжах двойной цепи. В работе [16] показана возможность описания динамики конформационного перехода в терминах смещений центров масс мономерных звеньев ($\mathbf{R} = (m_p \mathbf{r}_p + 2m_0 \mathbf{r}_q)/M$) и смещений пар нуклеозидов относительно остова ($\mathbf{r} = \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_q$). Возможность такого описания обусловлена пренебрежением относительными смещениями нуклеозидов в парах, что характерно для $B \rightarrow A$ -переходов. Важно отметить, что разность масс нуклеиновых оснований не оказывает влияния на динамику макромолекулы.

При построении явного вида гамильтониана удобно перейти к переменным, описывающим кручение моно-

мерного звена (φ) и сдвиг пары оснований вдоль диадной оси (r) (рис. 19). Как известно [29,30], эти компоненты взаимосвязаны и традиционно используются при расчете энергии двойной спирали. Изгибная деформация цепи меняется синхронно крутильной и ее учет не приводит к качественно новым результатам [35]. Таким образом, гамильтониан может быть записан в следующем виде:

$$E = E_1 + E_2 + E_3,$$

где энергия кручения цепочки

$$E_1 = \sum_n \frac{1}{2} I \dot{\varphi}_n^2 + \frac{1}{2} K (\varphi_{n+1} - \varphi_n)^2,$$

энергия внутримonomерной конформационной перестройки

$$E_2 = \sum_n \frac{1}{2} m \dot{r}_n^2 + \frac{1}{2} k (r_{n+1} - r_n)^2 + \Phi(r_n),$$

а энергия взаимодействия крутильной деформации и внутримonomерной конформационной координаты

$$E_3 = \sum_n G(r_n) (\varphi_{n+1} - \varphi_{n-1}).$$

Здесь I и m — момент инерции и приведенная масса мономерного звена цепи, K и k — силовые постоянные взаимодействия соседних мономеров, $\Phi(r)$ — двухъямная потенциальная функция структурного перехода между стабильными состояниями мономера. В силу энергетической неэквивалентности устойчивых состояний системы функция $\Phi(r)$ должна быть несимметричной. Для ее описания удобно использовать выражение (43), а для характеризующей взаимодействие подрешеток функции G — выражения $G(r) = X(u_1^2 - r^2)/u_0^2$. Параметр X отвечает за изменение высоты эффективного барьера внутримonomерного потенциала при скручивании макромолекулы ДНК.

Анализ данной модели показывает, что цепочка имеет два устойчивых однородных состояния: основное $\{r_n = u_1 < 0, \rho_n = 0\}_{n=-\infty}^{+\infty}$, соответствующее В-состоянию молекулы ДНК, и более высокое по энергии состояние $\{r_n = u_2 > 0, \rho_n = \rho(u_2) < 0\}_{n=-\infty}^{+\infty}$, соответствующее метастабильной А-конформации, где $\rho_n = \varphi_{n+1} - \varphi_n$ — относительное смещение n -го мономера цепочки. Такая неэквивалентность этих состояний соответствует неэквивалентности В- и А-конформаций при физиологических условиях.

На основании выполненных количественных оценок была показана возможность эффективного механизма дальнего действия, осуществляемого за счет движения нетопологических \mathbf{b}_1 -солитонов [13–15]. Предложенный солитонный механизм позволил дать непротиворечивую интерпретацию экспериментальным данным [36–38].

5.3. Топохимическая полимеризация диацетиленов

Твердофазная полимеризация диацетилена (ДА) является истинной топохимической реакцией, которая протекает в недеформированном кристалле в отсутствие дефектов решетки. Начинаясь в точках, случайным образом распределенных по всему объему кристалла, полимеризация протекает внутри мономерного кристалла гомогенно [39–42]. Растущие макромолекулы

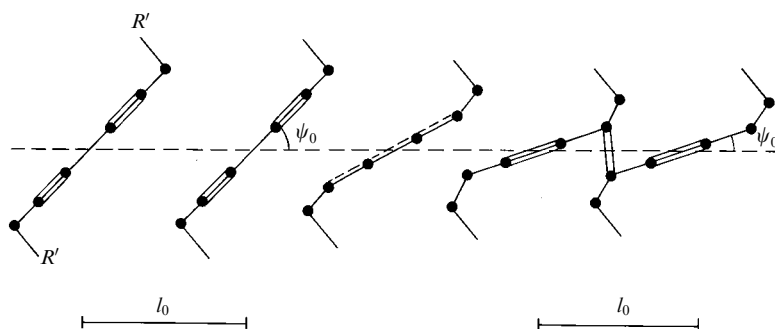


Рис. 20. Топохимическая полимеризация диацетилена. Показан начальный мономерный (а) и конечный полимерный кристалл (б)

полимера образуют твердый раствор макромолекул в мономерном кристалле. В результате сохраняется целостность исходного кристалла. Таким образом, твердофазная полимеризация ДА по сути представляет собой специфический фазовый переход "твердый мономер — твердый полимер", в результате которого совершенный монокристалл мономера переходит в совершенный монокристалл полимера без участия в этом переходе жидкоподобного переходного состояния.

Мономерное звено ДА и конфигурация образующейся полимерной молекулы показаны на рис. 20, где символами R и R' обозначены радикалы — боковые заместители. Реакция полимеризации представляет собой реакцию 1,4-транс-присоединения, осуществляющуюся за счет специфических поворотов молекул мономера относительно их центров масс с одновременным сближением последних на 0,04–0,1 постоянной решетки мономерного кристалла. В результате данной стереоспецифической полимеризации образуется стереорегулярный полимер с малым числом дефектов. В ряде случаев длина образующейся цепи сравнима с размерами монокристалла.

Сущность процессов, происходящих при топахимической полимеризации диацетилена легко пояснить при помощи схемы, приведенной на рис. 20. В мономерном монокристалле молекулы располагаются стопками вдоль одного из кристаллографических направлений таким образом, что последний атом углерода одной из молекул оказывается приближенным на расстояние $r \sim 4 \text{ \AA}$ к первому атому углерода соседней молекулы. Полимеризация осуществляется путем последовательных поворотов каждой молекулы, что приводит к изменению угла наклона мономерной единицы к оси стопки. В идеальных случаях такое изменение угла наклона происходит даже без перемещения центров масс отдельных молекул. Выполнение этого условия (или малое отклонение от него) соответствует "принципу наименьших перемещений" для топахимических реакций, сформулированному в [43]. Кроме того, при этом сохраняется тип пространственной упаковки боковых заместителей R, удельный объем и пространственная симметрия кристаллической решетки в ходе полимеризации. В большинстве полидиацетиленов обнаружены приблизительно одинаковые значения длин повторяющегося звена макромолекулы ($\sim 4,91 \text{ \AA}$), а также длин и углов связей между атомами углерода, составляющих скелет цепи [44].

Результаты экспериментальных исследований качественно подтверждают геометрическую модель, показанную на рис. 20. В ряде случаев один и тот же

диацетиленовый мономер удается получить в различных кристаллических модификациях, резко различающихся по реакционной способности. Следовательно, реакционная способность диацетиленов в твердой фазе контролируется геометрической упаковкой мономера, а не химической природой боковых заместителей R и R' [39]. С другой стороны, знание одних лишь параметров упаковки не позволяет однозначно судить о реакционной способности того или иного ДА. Известен ряд мономеров, обладающих практически идентичной кристаллографической упаковкой, однако заметно различающихся по реакционной способности.

В приближении квазиодномерной изолированной цепи твердофазная топахимическая полимеризация диацетилена может быть описана "молекулярно-механической" моделью. В этом случае молекулы мономера заменяются абсолютно жесткими "гантелями" с массой M и моментом инерции I . Экзотермический потенциал $U(\varphi)$ задает зависимость энергии мономерного звена от угла его наклона к кристаллографической оси. Данный угол играет роль координаты реакции. Смещения центров масс мономерных звеньев и геометрия деформации элементарной ячейки контролируются гармоническими связями с жесткостями K_1, K_2, K_3, K_4 : связи с жесткостями K_3 и K_4 соединяют идентичные концы гантелей (в случае неодинаковых боковых заместителей R и R' значения этих жесткостей различны), а связи с жесткостями K_1 и K_2 — противоположные, т.е. являются диагональными. Потенциал $U(\varphi)$ при $-\pi \leq \varphi \leq \pi$ имеет только один минимум в точке $0 < \varphi_m < \psi_0$, где $\psi_0 < \pi$ — равновесное значение угла наклона мономера к кристаллографической оси в мономерном кристалле.

Энергия деформации модельной решетки

$$E_d = \sum_n \left[\frac{1}{2} K_1 (L_n - L_0)^2 + \frac{1}{2} K_2 (S_n - S_0)^2 + \frac{1}{2} K_3 (l_n^u - l_0)^2 + \frac{1}{2} K_4 (l_n^d - l_0)^2 + U(\varphi_n) \right],$$

где L_n, S_n, l_n^u, l_n^d — текущие длины связей, а L_0, S_0 и l_0 — их равновесные длины в мономерном кристалле. Длина l_0 — постоянная решетки в мономерном кристалле, $L_0 = (l_0^2 + a^2 + 2al_0 \cos \psi_0)^{1/2}$ и $S_0 = (l_0^2 + a^2 - 2al_0 \cos \psi_0)^{1/2}$ — длины диагональных связей (a — длина молекулы мономера).

Учитывая деформацию межмономерных связей при полимеризации ДА, запишем гамильтониан системы в переменных, характеризующих смещения центров масс

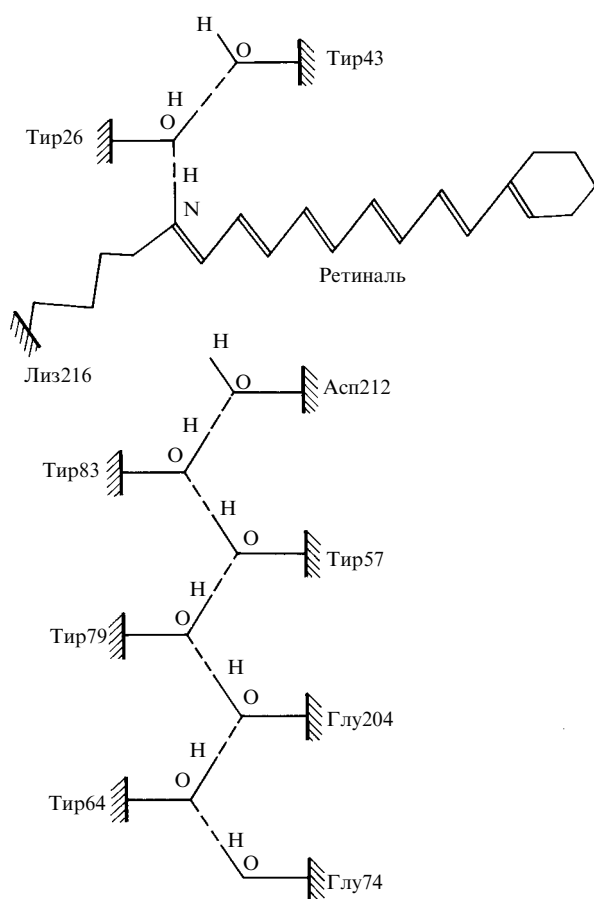


Рис. 21. Структура протонотransмиссивного пути молекулы бактериородопсина [53]

мономерной единицы R и углов наклона φ :

$$\begin{aligned}
 E &= \sum_n \left(\frac{1}{2} M \dot{R}_n^2 + \frac{1}{2} I \dot{\varphi}_n^2 \right) + E_d = \\
 &= \sum_n \left\{ \frac{1}{2} M \dot{R}_n^2 + \frac{1}{2} I \dot{\varphi}_n^2 + \frac{1}{2} K (R_{n+1} - R_n)^2 + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2} k (\varphi_{n+1} - \varphi_n)^2 + (\varphi_n - \psi_0) [X_+ (R_{n+1} - R_n) + \right. \\
 &\quad \left. + X_- (R_n - R_{n-1})] + U_1(\varphi_n) \right\},
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 K &= (l_0 + a \cos \psi_0)^2 (K_1 L_0^{-2} + K_2 S_0^{-2}) + K_3 + K_4, \\
 k &= \frac{a}{4} (K_3 + K_4) - a l_0 \sin \psi_0 (K_1 L_0^{-2} + K_2 S_0^{-2}), \\
 \lambda &= 2 a l_0 \sin \psi_0 (K_1 L_0^{-2} + K_2 S_0^{-2}), \\
 X_+ &= \frac{a}{2} (K_3 - K_4) - a l_0 \sin \psi_0 (K_1 L_0^{-2} + K_2 S_0^{-2}), \\
 X_- &= \frac{a}{2} (K_4 - K_3) - a l_0 \sin \psi_0 (K_1 L_0^{-2} + K_2 S_0^{-2}).
 \end{aligned}$$

Эффективный потенциал $U_1(\varphi) = U(\varphi) + \lambda(\varphi - \psi_0)^2$ в общем случае будет уже иметь два минимума: один $\psi_1 \approx \varphi_m$, другой $\psi_2 \approx \psi_0$. Абсолютный минимум ψ_1 соответствует полимерному состоянию цепочки, более высокий ψ_2 — ее мономерному состоянию.

В данной модели движение топологического **te**-солитона соответствует элементарному акту роста полимер-

ной цепи, причем конечный пробег солитона может приводить к существенному уменьшению наблюдаемой энергии активации. Торможение солитона и формирование границы раздела мономер-полимер соответствует обрыву цепи и образованию дефекта в монокристалле. С другой стороны, влияние внешних напряжений и процесса релаксации кристалла от мономерной фазы к полимерной может заметно сказываться на времени жизни **te**-солитона, что приводит к изменению молекулярно-массового распределения с увеличением конверсии.

5.4. Модель подвижности протонов в сильно поляризованной цепи водородных связей

Протонный транспорт в молекулярных системах с цепочками водородных связей является одной из важных проблем биофизики. Так, трансмембранный протонный транспорт является промежуточным механизмом преобразования энергии в биосистемах [45]. Согласно известной гипотезе Митчелла, промежуточным этапом реализации энергии окисления пищевых продуктов в митохондриях клеток является энергизация их сопрягающих мембран, которая достигается за счет повышения концентрации протонов на внешних поверхностях с помощью протонных помп.

Впервые молекулярный механизм трансмембранного переноса протонов обсуждался в работах [46, 47], где предполагалось, что протонные каналы образуют непрерывные цепочки полярных групп аминокислотных остатков трансмембранных белковых молекул. В дальнейшем эта гипотеза была развита в работах [48–50] и подтверждена исследованиями строения протонных каналов в молекуле бактериородопсина, являющейся светозависимой протонной помпой. Так, согласно [51] путь протонов в молекуле бактериородопсина проходит по аминокислотным остаткам, содержащим гидроксильную группу ОН.

В настоящее время считается, что перемещение протонов сквозь мембрану осуществляется через белковые протонные каналы и проходит по цепочкам водородных связей $\text{O}-\text{H} \cdots \text{O}-\text{H} \cdots \text{O}-\text{H} \cdots \text{O}-\text{H} \cdots$, которые образуют аминокислотные остатки, содержащие группу $\text{O}-\text{H}$ (серин, треонин, тирозин). В молекуле бактериородопсина цепочку водородных связей образуют остатки тирозина, входящие в состав семи трансмембранных α -спиральных сегментов молекулы [52, 53] (рис. 21).

Цепочка водородных связей может также находиться и в другом состоянии $\text{H}-\text{O} \cdots \text{H}-\text{O} \cdots \text{H}-\text{O} \cdots \text{H}-\text{O} \cdots$. При отсутствии внешнего поля оба состояния цепочки эквивалентны. Наличие большого протонного градиента у энергетической мембраны клетки приводит к появлению электрического трансмембранного поля напряженности $\mathcal{E} \sim 10^7$ В м⁻¹, приводящего к поляризации цепочки водородных связей, образующей протонный канал. При этом два основных состояния цепочки будут уже энергетически неэквивалентны. Таким образом, трансмембранные цепочки водородных связей в биосистемах являются бистабильными с энергетически невырожденными основными состояниями.

При отсутствии внешнего электрического поля, направленного вдоль цепи, протон Н на каждой водородной связи $\text{O}-\text{H} \cdots \text{O}$ будет иметь два энергетически эквивалентных устойчивых положения равновесия, разделенных барьером симметричного двухъямного потен-

циала. Этот потенциал можно сконструировать как сумму двух одноямыных кислород-протонных потенциалов.

Взаимодействие протона с атомом кислорода удобно описать потенциалом Морзе

$$U(r) = D_0 \{ \exp[-b(r - r_0)] - 1 \}^2,$$

где D_0 и r_0 — энергия и длина валентной связи О—Н в изолированной гидроксильной группе, b — феноменологический параметр потенциала, который можно определить из частоты продольного колебания валентной связи, r — текущая длина валентной связи. Будем считать, что протон всегда находится на линии водородной связи. Тогда его двухъямный симметричный потенциал можно определить как сумму двух потенциалов Морзе [54–56]

$$\begin{aligned} V(u, \rho) = & U\left(\frac{l+\rho}{2} + u\right) + U\left(\frac{l+\rho}{2} - u\right) - \\ & - U\left(\frac{l}{2} + u_0\right) - U\left(\frac{l}{2} - u_0\right) = \\ = & \varepsilon_0(\alpha - 1)^{-2} \left\{ \left[\alpha - \cosh(bu) \exp\left(-\frac{1}{2}b\rho\right) \right]^2 + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2}[1 - \exp(-b\rho)] \right\}, \end{aligned} \quad (46)$$

где l — шаг решетки, ρ — относительное удлинение водородной связи, u — координата протона, отсчитываемая от точки, расположенной посередине отрезка, соединяющего соседние атомы кислорода.

В положении равновесия цепочки потенциал (46) имеет два минимума $u = \pm u_0$, где u_0 находится из уравнения $\alpha = \cosh(bu_0) = (1/2) \exp\{b[(l/2) - r_0]\}$, разделенных барьером высоты $\varepsilon_0 = D_0(1 - \alpha^{-1})^2$. При $\rho \neq 0$ минимумы потенциала $\pm u(\rho)$ определяются из уравнения $\cosh(bu) = \alpha \exp(b\rho/2)$, а высота барьера $\varepsilon(\rho) = D_0[1 - \alpha^{-1} \exp(-b\rho/2)]^2$. Потенциал (46) будет двухъямным только при $\rho > \rho_0 = -2b^{-1} \ln \alpha$, при сильном сжатии связи $\rho \leq \rho_0$ он становится симметричным одноямыным потенциалом.

Энергию водородной связи, когда протон находится в одном из двух своих основных состояний, опишем гармоническим потенциалом $V_{\text{ОО}}(\rho) = (1/2)K\rho^2$, где K — постоянная жесткости водородной связи. В этом случае последний член потенциала (46) должен быть заменен потенциалом $V_{\text{ОО}}(\rho)$ так, чтобы полная энергия связи О—Н...О $W(u, \rho) = V_{\text{ОН}}(u, \rho) + V_{\text{ОО}}(\rho)$, где

$$V_{\text{ОН}}(u, \rho) = D_0 \left[1 - \alpha^{-1} \cosh(bu) \exp\left(-\frac{1}{2}b\rho\right) \right]^2. \quad (47)$$

Пусть теперь цепочка находится во внешнем постоянном электрическом поле напряженности \mathcal{E} . Тогда общую энергию цепочки можно представить в виде

$$\begin{aligned} E = & \sum_n \frac{1}{2} m \dot{r}_n^2 + \frac{1}{2} M \dot{R}_n^2 + \frac{1}{2} k (r_{n+1} - r_n)^2 + \\ & + \frac{1}{2} K (R_{n+1} - R_n)^2 + V_{\text{ОН}}(u_n, \rho_n) + e \mathcal{E} u_n, \end{aligned} \quad (48)$$

где R_n — смещение n -го атома кислорода массы M из своего положения равновесия, r_n — смещение n -го протона массы m , отсчитываемое от середины n -го шага

цепочки, находящейся в положении равновесия, k — жесткость протон-протонного взаимодействия, e — заряд протона, переменные

$$u_n = r_n - \frac{1}{2}(R_n + R_{n+1}), \quad \rho_n = R_{n+1} - R_n.$$

При аналитическом исследовании двухъямный потенциал (47) в гамильтониане (48) целесообразно заменить более простым, слабо отличающимся при малых ρ_n , выражением

$$\Phi(r_n) + [G_1(r_n) + G_2(r_n)](R_{n+1} - R_n),$$

где потенциал $\Phi(r)$ задан формулой (43), а функции $G_i(r_n)$ определяются следующим образом:

$$G_1(r) = X_1(r - u_1)u_0^{-1}, \quad G_2(r) = X_2(u_1^2 - r^2)u_0^{-2}.$$

Здесь параметр $\varepsilon_1 = e \mathcal{E} u_0 > 0$, параметр $X_1 = e \mathcal{E} du(\rho)/d\rho|_{\rho=0}$ характеризует изменение асимметрии потенциала при деформации связи, а параметр $X_2 = d\varepsilon(\rho)/d\rho|_{\rho=0}$ — изменение высоты барьера. Уровень отсчета энергии протона ε_2 выберем так, чтобы в основном по энергии состояния $r = u_1 < 0$ энергия $\Phi(u_1) = 0$. Тогда гамильтонovu функцию системы можно представить в виде суммы $E = E_1 + E_2 + E_3$, где

$$E_1 = \sum_n \left[\frac{1}{2} M \dot{R}_n^2 + \frac{1}{2} K (R_{n+1} - R_n)^2 \right]$$

— энергия кислородной подрешетки,

$$E_2 = \sum_n \left[\frac{1}{2} m \dot{r}_n^2 + \frac{1}{2} k (r_{n+1} - r_n)^2 + \Phi(r_n) \right]$$

— энергия протонной подрешетки, а

$$E_3 = \sum_n (G_1(r_n) + G_2(r_n))(R_{n+1} - R_n)$$

— энергия взаимодействия кислородной и протонной подрешеток. Гамильтонова функция E является естественным обобщением двухкомпонентной функции, впервые использованной для описания протонного транспорта в цепочке водородных связей [7, 24, 57].

В модели протонного транспорта движение **te**-солитона соответствует элементарному акту, в результате которого все протоны на некотором участке цепи переходят от "левого" атома кислорода к его "правому" соседу. Результирующий протонный ток складывается из серии последовательных пробегов топологических солитонов.

Список литературы

1. Бишоп А В кн. *Солитоны в действии* (М.: Мир, 1981) с. 72
2. Collins A *Adv. Chem. Phys.* **53** 225 (1983)
3. Косевич А М *Теория кристаллической решетки (физическая механика кристаллов)* (Харьков: Вища школа, 1988)
4. Давыдов А С *Солитоны в молекулярных системах* (Киев: Наукова думка, 1984)
5. Krumhansl J A, Schrieffer J R *Phys. Rev.* **B11** (9) 3535 (1975)
6. Брус А, Каули Р *Структурные фазовые переходы* (М.: Мир, 1984)
7. Zolotaryuk A V, Spatschek K H, Laedke E W *Phys. Lett. A* **101** (9) 517 (1984)
8. Gonzales J A, Holyst J A *Phys. Rev. B* **35** (7) 3643 (1987)
9. Волков С Н *Нелинейные волны и конформационная подвижность ДНК*. Препринт ИТФ-84-52Р (Киев, 1984) 35 с

10. Volkov S N *Phys. Lett. A* **136** (1/2) 41 (1989)
11. Волков С Н, Савин А В *Укр. физ. ж.* **37** (4) 498 (1992)
12. Савин А В, Волков С Н *Матем. моделирование* **4** (11) 36 (1992)
13. Волков С Н *Докл. АН УССР. Сер. А* (2) 48 (1988)
14. Volkov S N *J. Theor. Biol.* **143** (4) 485 (1990)
15. Волков С Н *Биополимеры и клетка* **6** (4) 21 (1990)
16. Волков С Н *Молек. биология* **26** (4) 835 (1992)
17. Peyrard M, Odier S, Lavenir E, Schnur J M *J. Appl. Phys.* **57** (7) 2626 (1985)
18. Peyrard M, Odier S, Oran E, Boris J, Schnur J M *Phys. Rev. B* **33** (7) 2350 (1986)
19. Громов Л А, Смирнов В В, Маневич Л И, Ениколопан Н С *Докл. АН СССР* **309** (2) 350 (1989)
20. Manevitch L I, Smirnov V V *Phys. Lett. A* **165** (3) 365 (1992)
21. Бриллюэн Л, Пароди М *Распространение волн в периодических структурах* (М.: ИЛ, 1959)
22. Смирнов В В, Маневич Л И *Хим. физика* **11** (9) 1269 (1992)
23. Астахова Т Ю, Виноградов Г А, Маневич Л И, Смирнов В В *Высокомолек. соед. А* **34** (10) 114 (1992)
24. Antonchenko V Ya, Davydov A S, Zolotaryuk A V *Phys. Stat. Sol. (b)* **115** (2) 631 (1983)
25. Laedke E W, Spatschek K H, Wilkens M Jr, Zolotaryuk A V *Phys. Rev. A* **32** (2) 1161 (1985)
26. Волков С Н *Физ. многочастичных систем* (18) 13 (1990)
27. Ениколопан Н С, Маневич Л И, Смирнов В В *Хим. физика* **10** (3) 389 (1991)
28. Manevitch L I, Mitlin V S *J. Pol. Sci. Pt. B. Polymer Phys. Ed.* (1) (1990)
29. Зенгер В *Принципы структурной организации нуклеиновых кислот* (М.: Мир, 1987)
30. Иванов В И *Молек. биология* **17** (3) 616 (1983)
31. Блюменфельд Л А *Проблемы биологической физики* (М.: Наука, 1977)
32. Гольданский В И, Крупянский Ю Ф, Фролов Е Н *Молек. биология* **17** (3) 532 (1983)
33. Krumhansl J A, Alexander G B In *Structure and Dynamics: Nucleic Acids and Proteins* (Eds. Clementi E, Sarma R H) (New York: Academic Press, 1983) p. 61
34. Volkov S N, Kosevich A M *J. Biomol. Struct. Dynamics* **8** (5) 1069 (1991)
35. Волков С Н *Нелинейная динамика макромолекул типа ДНК. Препринт ИТФ-89-87Р* (Киев, 1990) 21 с
36. Crothers D M, Fried M *Cold. Spring Harbor Symp. Quant. Biol.* **47** 283 (1983)
37. Luchnik A N *Bio Essays* **3** (6) 249 (1985)
38. Лазуркин Ю С *Биополимеры и клетка* **2** (1) 283 (1986)
39. Kaiser J, Wegner G, Fisher E W *Isr. J. Chem.* **10** (1) 157 (1972)
40. Leyer R J, Wegner G, Wettling W *Ber. Bunsenges. phys. Chem.* **82** (2) 697 (1978)
41. Schermann W, Wegner G, Williams J O, Thomas J M *J. Polym. Sci. Polym. Phys. Ed.* **13** (3) 753 (1975)
42. Dudley M, Sherwood J M, Ando D J, Bloor D In *Polydiacetylenes* (Dordrecht, Netherlands: Martinus Nijhoff, 1985) p. 87
43. Bauman R H, Yee K C *Macromol. Rev.* **13** (1) 219 (1978)
44. Enkelman R H *Adv. Polym. Sci.* **63** (1) 91 (1984)
45. Скулачев В П *Биоэнергетика. Мембранные преобразователи энергии* (М.: Высшая школа, 1989)
46. Onsager L *Science* **156** (3774) 541 (1967)
47. Onsager L *Science* **166** (3911) 1359 (1969)
48. Nagle J F, Morowitz H J *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **75** (1) 298 (1978)
49. Nagle J F, Mille M, Morowitz H J *J. Chem. Phys.* **72** (7) 3959 (1980)
50. Nagle J F, Tristram-Nagle S J. *Membrane Biol.* **74** (1) 1 (1983)
51. Ovchinnikov Yu A, Abdulaev N G, Feigina M Yu, Kiselev A V, Lobanov N A *FEBS Lett.* **100** (2) 219 (1979)
52. Merz H, Zundel G *Biochem. and Biophys. Res. Commun.* **101** (2) 540 (1981)
53. Krasnogolovets V V, Protchenko N A, Tomchuk P M, Guriev V S *Inter. J. Quantum Chem.* **33** (2) 327 (1988)
54. Kryachko E S *Chem. Phys.* **143** (3) 359 (1990)
55. Zolotaryuk A V, Pnevmatikos St, Savin A V *Physica D* **51** (2) 407 (1991)
56. Savin A V, Zolotaryuk A V *Phys. Rev. A* **44** (12) 8167 (1991)
57. Золотарюк А В *ТМФ* **68** (2) 415 (1986)

SOLITONS IN NON-DEGENERATED BISTABLE SYSTEMS

L.I. Manevitch, V.V. Smirnov

N.N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences

4, Ulitsa Kosygina, 117977, Moscow, Russia

Tel. (7-095) 939-7515. Fax (7-095) 137-8284

E-mail: polycon@ecosrv.msk.su

A.V. Savin

State Institute of Problems of Physics and Technology

13/7, Ulitsa Prechistenka, 119034, Moscow, Russia

Tel. (7-095) 248-8230

E-mail: savin@dep11.ifftr.msk.su

S.N. Volkov

N.N. Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, Academy of Sciences of Ukraine, Kiev

14-b, Ulitsa Metrologicheskaya, 252143, Kiev, Ukraine

Tel. (044) 266-9159

E-mail: qeftp@gluk.apc.org

The paper subject relates to the soliton-like elementary excitations in the bistable systems, whose energies of different equilibrium states are not equal. The particular physical systems described by the common Hamiltonian in the framework of approach proposed are discussed. The analysis of continuum equation of motion shows that in such systems both the non-topological solitons connected with the energy transfer and the topological ones described the transitions between different states (state transfer) exist. The computer simulation data are compared with the solutions of analytical models.