Национальная Академия наук Украины
Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова

На правах рукописи

Мингалеев
Сергей Фёдорович

ЭФФЕКТЫ ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ И АНГАРМОНИЗМА В НЕЛИНЕЙНОМ ТРАНСПОРТЕ ЭНЕРГИИ И ЗАРЯДА

01.04.02 — Теоретическая физика

Автореферат диссертации
на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Киев — 1997

Диссертацией является рукопись.

Работа выполнена в	*Институте теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины*
Научный руководитель:	*доктор физ.-мат. наук, профессор Гайдидей Юрий Борисович, Институт теоретической физики НАН Украины*
Официальные оппоненты:	*доктор физ.-мат. наук Волков Сергей Наумович, Институт теоретической физики НАН Украины*
	доктор физ.-мат. наук, профессор Давыдова Татьяна Александровна, Институт ядерных исследований НАН Украины
Ведущая организация:	*Киевский национальный университет, физический факультет, кафедра теоретической физики.*

Защита состоится „*27*“ *февраля* 1997 г. в 11^{00} на заседании специализированного учёного совета Д 01.76.01 при Институте теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова Национальной Академии наук Украины (252143, г. Киев-143, ул. Метрологическая, 14-б).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины.

Автореферат разослан „*20*“ *января* 1997 г.

Учёный секретарь
специализированного учёного совета
доктор физ.-мат. наук В.Е. КУЗЬМИЧЕВ

Общая характеристика работы

Актуальность темы. В последние десятилетия большое развитие приобрела теория нелинейных волновых процессов. Это произошло благодаря открытию, в шестидесятые годы, солитонов — устойчивых локализованных возбуждений, которые распространяются без изменения своей формы и упруго взаимодействуют друг с другом при столкновениях. Эти их свойства делают солитоны идеальными возбуждениями для эффективного переноса на большие расстояния энергии, заряда и информации в различных физических системах. Примерами могут быть солитоны на поверхности жидкости и в плазме, световые импульсы в нелинейных оптических волокнах, кинки в магнетиках, бризеры на Джозефсоновских контактах, нелинейные возбуждения в полимерах, биологических макромолекулах и плёнках Ленгмюра–Блоджетта… Обычно при исследовании этих систем ограничивались степенным разложением нелинейных и дисперсионных слагаемых уравнений движения, учитывая при этом только самые главные члены разложения. Использование такого приближения часто приводит к полностью интегрируемым уравнениям движения и позволяет полностью описать свойства широколокализованных солитонных возбуждений малой амплитуды. Однако, это приближение оказывается неспособным описать некоторые яркие качественные эффекты, свойственные сильнолокализованным возбуждениям. Одним из таких эффектов является, например, обострение солитонов на поверхности жидкости, связанное с насыщением дисперсии при больших значениях волнового вектора. Поэтому сейчас появляется тенденция к усложнению теоретических моделей, направленная на учёт нескольких, часто конкурирующих, типов нелинейности и уточнение их конкретного (неполиномиального) вида, с одной стороны, и использование неполиномиальных законов дисперсии с учетом конкуренции между дальнодействием дисперсионных взаимодействий и дискретностью системы, с другой.

Именно в этих направлениях и проводятся исследования в данной диссертационной работе, причем в качестве основной изучаемой физической системы рассматривается одномерная ангармоническая молекулярная цепочка, вдоль которой могут распространяться как внутримолекулярное возбуждение или избыточный заряд, так и упругое сгущение самой цепочки. При изучении этой системы используется квазиклассический подход А.С. Давыдова. Хотя эта система интенсивно изучается уже более десяти лет, некоторые вопросы остаются еще недостаточно выясненными. Так, известно, что наличие в системе двух типов нелинейности — экситон–фононной связи и ангармонизма взаимодействия соседних молекул — приводит к существованию в цепочке двух видов солитонов, давыдовского и акустического. Поэтому возникает интересный вопрос о характере взаимодействия этих солитонов — и ответ на него даётся в первой главе диссертации. Известно также, что внутримолекулярное возбуждение переходит с одной молекулы на другую за счёт некоторого нелокального, чаще всего диполь–дипольного, резонансного взаимодействия. Однако почти во всех предыдущих исследованиях использовалось приближение ближайших соседей, которое искажает закон дисперсии системы и поэтому не позволяет описать некоторые её интересные свойства. Новые эффекты, связанные с учетом нелокального характера межмолекулярного дисперсионного взаимодействия, изучаются во второй и третьей главах диссертации. При этом указывается на важность учёта пространственной структуры молекулярной цепочки.

Целью работы является изучение новых качественных эффектов, связанных с наличием в системе конкурирующих нелинейных и дисперсионных взаимодействий, а именно:

- исследование характера взаимодействия давыдовского и акустического солитонов в ангармонических молекулярных цепочках в зависимости от соотношения уровней двух конкурирующих типов нелинейности: экситон–фононной связи и ангармонизма межмолекулярного взаимодействия;

- изучение свойств давыдовских солитонов при учёте нелокального характера межмолекулярного дисперсионного взаимодействия в адиабатическом и гармоническом приближениях, когда уравнение движения системы сводится к нелокальному нелинейному уравнению Шрёдингера.

Научная новизна полученных результатов состоит в том, что в диссертации было впервые:

- показано, что конкурирующий характер двух типов нелинейности (экситон–фононной связи и ангармонизма) обуславливает нетривиальную зависимость характера взаимодействия давыдовского и акустического солитонов от соотношения уровней нелинейности, приводя к отталкиванию солитонов при слабом ангармонизме и к образованию их связанного состояния при сильном ангармонизме;
- предложено нелокальное нелинейное уравнение Шредингера (НЛ–НУШ) для описания систем, закон дисперсии линейных волн которых насыщается при больших значениях волнового вектора;
- найдены неподвижные стационарные солитонные решения НЛ–НУШ и показано, что, в отличии от обычного НУШ, они существуют только при уровне нелинейности системы ниже определённого критического значения. При сверхкритическом уровне нелинейности происходит коллапс волновой функции.
- показано, что вследствие неинвариантности уравнения НЛ–НУШ по отношению к преобразованиям Галилея, для него (в отличие от обычного НУШ) не существует движущихся стационарных со-

литонных решений: при попытке же сдвига с места неподвижного солитона, он начинает непертурбативно излучать;

- установлено наличие бистабильности солитонных решений в дискретном НЛ–НУШ в случае, когда дисперсионное взаимодействие между молекулами достаточно медленно ослабляется с расстоянием между ними;

- показано, что в случае дискретного НЛ–НУШ со степенной нелокальностью возможны ситуации, когда солитонное решение теряет устойчивость, а устойчивым становится экситонное (делокализованное) возбуждение.

Теоретическая и практическая ценность. Результаты, полученные в диссертации, позволяют понять особенности локализации и нелинейного транспорта энергии (заряда) в одномерных молекулярных системах, связанные с учётом дальнодействия и ангармонизма межмолекулярных взаимодействий. В диссертации показано, что их учёт приводит к появлению качественно новых эффектов, таких как мультистабильность и образование связанных состояний солитонов, которые нужно принимать во внимание при анализе экспериментальных наблюдений.

Апробация работы и публикации. Основные результаты диссертации докладывались на Первой и Второй Всеукраинских конференциях молодых учёных (Киев, апрель 1994 и май 1995); на Международном совещании по статистической физике и теории конденсированных систем (Львов, сентябрь 1995 г.); на международной конференции “Copenhagen Conference on Complex Dynamics in Spatially Extended Systems” (Дания, Копенгаген, сентябрь 1995); на международной конференции “Fluctuations, Nonlinearity and Disorder” (Греция, Гераклион, октябрь 1996) и на семинарах Института теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины.

По теме диссертации сделано восемь работ, три из которых опубликованы в виде статей в научных журналах, одна издана препринтом, а четыре — в сборниках трудов и тезисах конференций.

Личный вклад автора. В работах, выполненных с соавторами, личный вклад заключался в обсуждении постановки задач и формулировке выводов, а также выполнении основных аналитических и численных расчетов.

Структура и объём диссертации. Диссертационная работа изложена на 137 страницах и иллюстрирована 32 рисунками; состоит из введения, трёх глав, заключения с обзором основных результатов и перечня литературы из 122 наименований.

Содержание работы

Во **Введении** обоснована актуальность темы диссертации, проанализирована проблематика, которой она посвящена, и определён круг рассматриваемых в работе задач.

В **первой главе**, “Связанное состояние давыдовского и акустического солитонов в ангармонических молекулярных цепочках”, изучается характер взаимодействия двух видов солитонов: акустического и давыдовского, которые существуют в ангармонических молекулярных цепочках при наличии экситон–фононного взаимодействия. Показано, что существует такое значение ангармонизма системы, при котором акустический и давыдовский солитоны не взаимодействуют. При более слабом ангармонизме эти солитоны отталкивают друг друга, а при более сильном — притягиваются и могут образовывать осциллирующее связанное состояние. Во вступлении в эту главу делается обзор современного состояния проблемы, формулируется цель главы и кратко излагается её содержание. Во втором разделе выводятся уравнения движения системы исходя из гамильтониана

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

где $\psi_n(t)$ – амплитуда внутримолекулярного возбуждения n-ой молекулы, а $\beta_n(t)$ – смещение n-ой молекулы из положения равновесия; J – энергия резонансного взаимодействия; χ – параметр связи внутримолекулярных возбуждений со смещением молекул; M – масса молекулы и, наконец, параметры ω и α характеризуют значения продольной упругости и кубического ангармонизма цепочки, соответственно. Зная расстояние между невозбуждёнными молекулами, ℓ, можно найти скорость продольного звука, $v_0 = \ell\sqrt{\omega/M}$. Используя континуальное приближение и переходя к движущейся системе координат $\vartheta = n\ell - vt$, можно свести уравнения движения цепочки к следующей системе уравнений на стационарные солитонные решения

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

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

где φ и u это безразмерные переменные, пропорциональные переменным ψ_n и $\beta_n - \beta_{n+1}$, соответственно. Значение параметра A при этом определяется условием нормирования волновой функции φ, а параметры B и g определяются выражениями

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

В заключение раздела упоминаются некоторые другие физические системы, которые описываются системой (2)–(3), и показывается, что эта система совпадает, после некоторых преобразований, с общеизвестной системой Энона–Элиса, которая является интегрируемой только при трёх значениях постоянной ангармонизма g : $g = 1,\ 6,\ 16$.

В третьем разделе найдены все возможные солитонные решения системы (2)–(3) в наиболее интересном из интегрируемых случаев, при $g = 6$. Показано, что существует только три вида стационарных солитонов:

Сверхзвуковые акустические солитоны

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

которые существуют при любых значениях ангармонизма, g.

Солитоны Давыдова–Золотарюка

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

которые существуют только при $g = 6$, но при любых скоростях.

Двугорбые солитоны

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

где R – постоянная интегрирования, которая может принимать произвольные значения, а

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

Это решение существует только при $g = 6$ и сверхзвуковых скоростях.

Первый тип солитонов известен уже очень давно, второй был найден А.С. Давыдовым и А.В. Золотарюком в 1984 году, а третий — Ю.Б. Гайдидеем, Дж.К. Илбеком, П.Л. Христиансеном и В.З. Энольским в 1992 году. Несколько позже и *численно* его нашел также А.В. Савин в своей докторской диссертации. В разделе показано, что двугорбый солитон является, на самом деле, двухсолитонным решением и содержит первые два типа солитонов как компоненты. Следовательно, в интегрируемом случае (т.е. при вполне определённом значении постоянной ангармонизма, $g = 6$) акустический и давыдовский солитоны взаимодействуют упруго, свободно проходя один через другой. Этот вывод подтверждается в четвёртом разделе, где рассчитаны энергии всех этих солитонных решений: энергия двугорбого солитона оказывается в точности равной сумме энергий акустического и давыдовского солитонов, *независимо* от расстояния, R, между его компонентами.

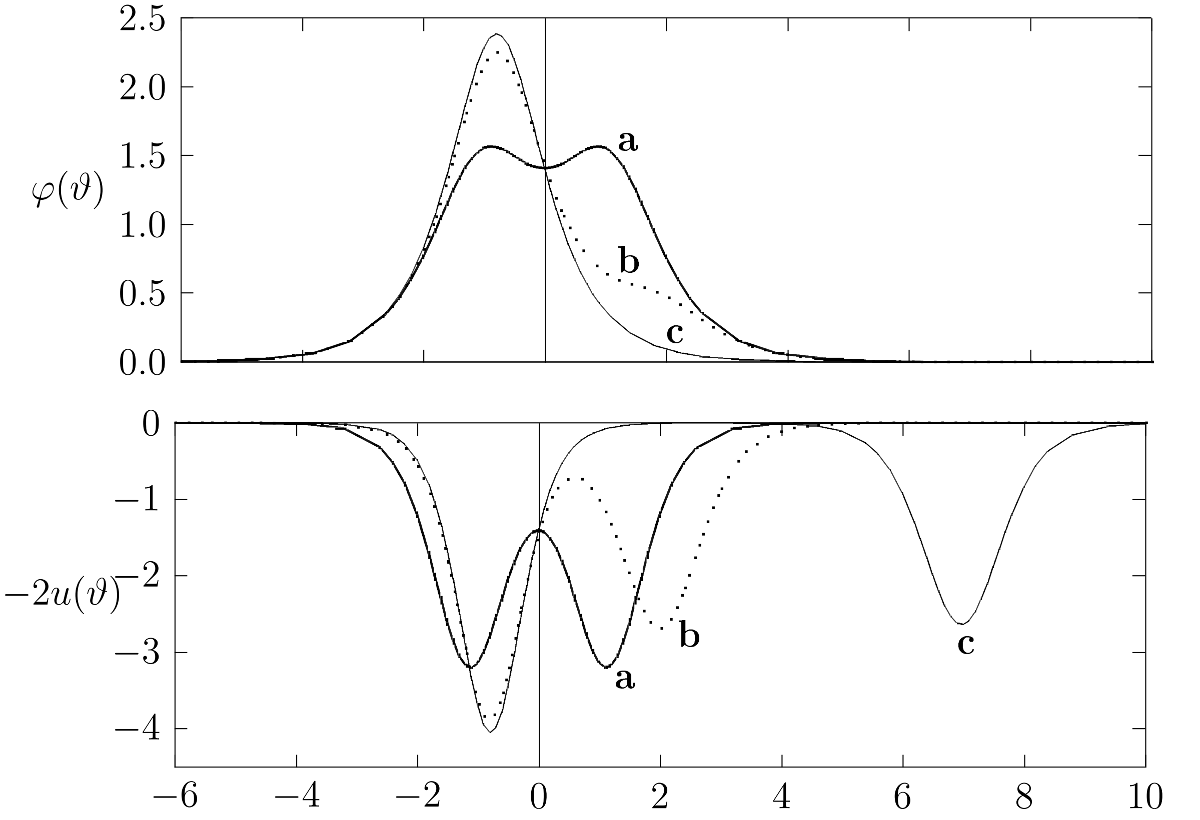

Рис. 1: Двугорбые солитоны при $v = 1.2v_0$ *и* $\vartheta_0 = 0$ *для нескольких значений* R*:* **a)** $R = 0$, **b)** $R = 1$, **c)** $R = 6$.

В пятом разделе изучается неинтегрируемый случай произвольных значений ангармонизма, g. Используя вариационный подход, мы показываем, что в *неинтегрируемом* случае энергия двугорбого солитона начинает зависеть от расстояния R таким образом, что при слабом ангармонизме ($g < 6$) давыдовский и акустический солитоны отталкиваются и поэтому двугорбый солитон распадается, а при сильном ($g > 6$) — притягиваются и могут образовывать осциллирующее связанное состояние с периодом колебаний, экспоненциально растущим с увеличением амплитуды колебаний. Если считать, что вдоль цепочки переносится заряженное возбуждение (избыточный электрон или дырка) в виде электросолитона, то его связанное состояние с акустическим солитоном будет резонансно взаимодействовать с внешним переменным электрическим полем.

Наконец, в шестом разделе проводится численное моделирование исходных *дискретных* уравнений движения системы, которое полностью подтверждает все предыдущие выводы и доказывает достаточно хорошую динамическую устойчивость солитонов при значениях $g = 4 \div 10$.

Завершается глава седьмым, заключительным разделом, в котором кратко отмечаются основные результаты главы и обсуждается возможность их проявления в реальных молекулярных цепочках.

Во **второй главе**, "Нелокальное нелинейное уравнение Шрёдингера", для описания систем с насыщающимся законом дисперсии предложено новое *нелокальное* нелинейное уравнение Шрёдингера и исследованы свойства его солитонных решений. Показано, что в противоположность обычному НУШ, его неподвижные стационарные солитонные решения существуют только когда уровень нелинейности системы не превышает некоторое критическое значение. Форма солитона изменяется от колоколообразной (при малом уровне нелинейности) до заострённой (при околокритическом уровне), причём решение обрывается на предельно заострённом солитоне с сингулярной зависимостью по координате. При этом заострённые солитоны являются неустойчивыми и коллапсируют. Движущиеся солитоны излучают энергию с длиной волны, пропорциональной скорости солитона. Интенсивность излучения экспоненциально уменьшается с уменьшением скорости и (или) уровня нелинейности. В результате солитон замедляется, однако время уменьшения скорости солитона до нуля является, по-видимому, бесконечно большим. Во вступлении во вторую главу делается обзор современного состояния проблемы, формулируется цель главы и кратко излагается её содержание. Далее, во втором разделе, напоминаются главные свойства солитонных решений обычного НУШ с произвольной степенью нелинейности

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

Уровень нелинейности системы определяется значением нормы

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

Пожалуй, главными свойствами уравнения (9) является то, что его стационарные солитонные решения существуют при *произвольном положительном* значении нормы, N, и являются устойчивыми при $p < 4$, *независимо* от значения N. Оба эти свойства утрачиваются стационарными решениями нелокального НУШ

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

которое мы предлагаем к рассмотрению в третьем разделе главы как обобщение НУШ на случай произвольного закона дисперсии линейных волн. В том же разделе начинается детальное обсуждение важного частного случая закона дисперсии — когда дисперсия насыщается при больших значениях волнового вектора и описывается экспоненциальным ядром нелокальности Кек–Бейкера

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

В четвёртом разделе находится неподвижное стационарное солитоноподобное решение нелокального НУШ (11)–(12) вида

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

где $z = \alpha x$. Показывается, что его форма меняется от колоколообразной (при больших значениях $B \equiv 1 + \alpha^2/\Lambda$) до заострённой (при $B \to (p+1)^2$), причём это решение обрывается на предельно обострённом солитоне

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

с сингулярной зависимостью по координате (см. рис. 2). При $B < (p+1)^2$ стационарных решений не существует.

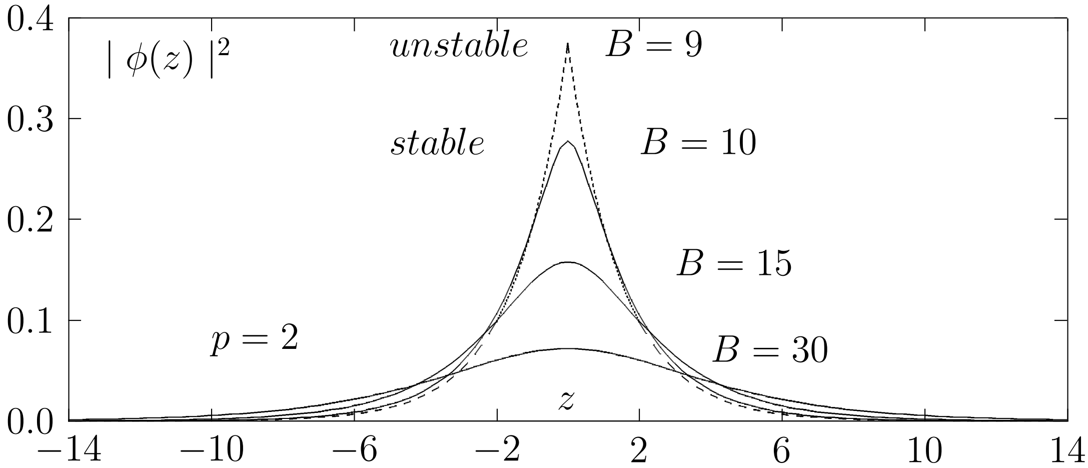

Рис. 2: Неподвижное стационарное солитонное решение НЛ–НУШ для $p = 2$

Пятый раздел развивает вариационный подход с целью исследования устойчивости найденного ранее стационарного решения. Оказывается, что на диаграмме "энергия–норма" он образует две ветви солитонов, сосуществующие в некотором промежутке значений нормы. Одна из этих ветвей соответствует устойчивым колоколообразным солитонам, а вторая — неустойчивым заострённым, которые со временем коллапсируют. При этом существует критическое значение нормы, при превышении которого не существует ни одного стационарного состояния и любое достаточно сильно локализованное начальное возбуждение коллапсирует. Справедливость этого вывода подтверждается прямыми численными расчётами. В шестом разделе изучаются свойства движущегося солитона и доказывается, аналитически и численно, наличие непертурбативного излучения позади солитона с длиной волны, пропорциональной скорости движения солитона. Наконец, в заключительном седьмом разделе второй главы кратко напоминаются и обсуждаются её самые важные результаты.

В **третьей главе** диссертации, "Эффекты нелокальных дисперсионных взаимодействий в дискретном нелинейном уравнении Шрёдингера", продолжаются исследования, начатые во второй главе, но теперь изучается не континуальная, а дискретная система. Как было показано во второй главе, учёт дисперсионной нелокальности приводит к исчезновению стационарных солитонов при больших значениях нормы, N, и к возможности коллапса возбуждения при этом. Однако в *дискретной* системе не может быть коллапса — вместо него происходит переход возбуждения в существенно локализованное состояние. Поэтому в дискретной системе могут сосуществовать уже не два, а три вида стационарных неподвижных солитонных состояний: два устойчивых (слабо– и сильнолокализованный) и один неустойчивый. При этом можно выделить три интервала значений нормы: при малых её значениях существует только слаболокализованное состояние, а при больших — только сильнолокализованное. При промежуточных значениях нормы сосуществуют все три стационарные солитонные состояния и становятся возможными, таким образом, интересные явления, связанные с взаимодействием и взаимопревращением различных типов солитонов. Кроме экспоненциальной Кек–Бейкеровской нелокальности, в главе рассмотрена степенная нелокальность, возникающая за счет мультиполь–мультипольного взаимодействия. Показано, что уже диполь–дипольное взаимодействие является достаточно "нелокальным" для возможности сосуществования слабо– и сильнолокализованных солитонов. Особенность закона дисперсии, присущая системам со степенной нелокальностью, приводит к возможности ситуации, когда слаболокализованный солитон теряет устойчивость и устойчивым становится *экситонное* (делокализованное) состояние. Во введении в третью главу делается обзор современного состояния проблемы, формулируется цель главы и кратко излагается её содержание. При этом отмечается важность учёта пространственной структуры молекулярной цепочки, которая описывается нелинейным уравнением Шрёдингера, в случае учёта нелокального характера межмолекулярного взаимодействия. Показывается, что в приближении фрактальной модели цепочки, широко распространённые системы с мультиполь–мультипольным дисперсионным взаимодействием между молекулами можно свести к эффективной линейной в пространстве цепочке с обобщённой степенной нелокальностью вида

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

где $s = \ell/D$, с некоторым целым значением ℓ ($\ell = 3$ для диполь–дипольного взаимодействия) и фрактальной размерностью цепочки, D. Исходя из экспериментальных значений D, делается вывод, что физически интересными являются значения $s \gtrsim 1.8$. Во втором разделе главы, исходя из соответствующего гамильтониана системы, выводится дискретное нелокальное нелинейное уравнение Шрёдингера (ДНЛ–НУШ)

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

Сначала ищутся его стационарные неподвижные решения

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

для которых уравнение движения (16) превращается в нелинейную систему алгебраических уравнений. В третьем разделе кратко описывается метод, который использовался для *численного* решения этой системы.

В четвертом разделе рассматривается экспоненциальная Кек–Бейкеровская нелокальность

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

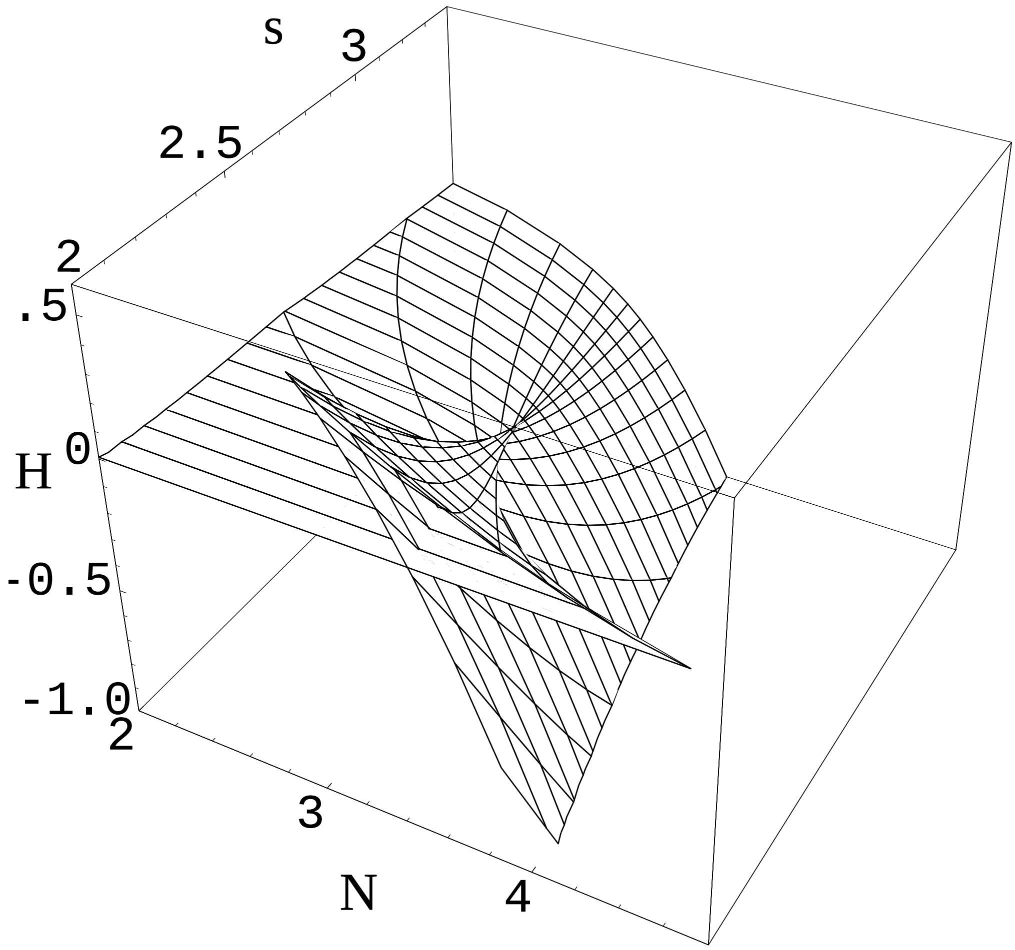

Рис. 3: Зависимость энергии, H, стационарных солитонных решений (17) системы (16), (15) от нормы, N, и параметра нелокальности, s, найденная вариационным методом с использованием экспоненциальной пробной функции. Имеет место бифуркация "ласточкин хвост".

для которой ДНЛ–НУШ в континуальном приближении полностью совпадает с уравнением, рассмотренным во второй главе. Найденное в ней аналитическое решение сравнивается с найденным численно решением дискретной системы. Показано, что в отличие от континуального уравнения, вследствие конкуренции между дискретностью и нелокальностью, свойства стационарных решений в ДНЛ–НУШ существенно зависят от значения параметра нелокальности α. А именно, для $\alpha \gtrsim 1.67$ свойства системы качественно не отличаются от её свойств в приближении ближайших соседей ($\alpha = \infty$), — каждому значению нормы

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

соответствует только одно стационарное солитонное решение. Если же $\alpha \lesssim 1.67$, то возникает новый интересный эффект мультистабильности солитонных решений: существует интервал значений нормы, где сосуществуют три стационарных солитонных решения, одно из которых является неустойчивым. Теперь уже в системе нет плавного перехода от слабо– к сильнолокализованному солитону: напротив, эти солитоны становятся резко отличными и могут сосуществовать, так что можно говорить о существовании в системе *двух разных типов устойчивых солитонов*. В промежутке их сосуществования форма солитонов является достаточно близкой к форме обострённого солитона, $\psi_n \sim e^{-const\cdot|n|}$, найденного во второй главе. Этот факт используется в самом большом пятом разделе главы, посвящённом изучению свойств системы при наличии степенной мультиполь–мультипольной нелокальности (15). А именно, показывается, что использование вариационного метода с экспоненциальной пробной волновой функцией позволяет получить результаты (см. рис. 3), которые качественно полностью совпадают с результатами численных расчетов. Как и в случае экспоненциальной нелокальности, существует критическое значение параметра нелокальности, $s_{cr} \approx 3.03$, такое что при $s < s_{cr}$ в системе возникает явление мультистабильности стационарных солитонных решений. Впрочем, особенностью степенной нелокальности является то, что при $s < 3$ закон дисперсии, при малых значениях волнового вектора, изменяется с квадратического на $\sim k^{s-1}$. Это приводит к одному важному следствию, доказанному аналитически точно, а именно: при $s \leq 2$ слаболокализованный солитон становится неустойчивым, а экситонное (делокализованное) состояние, напротив, приобретает устойчивость. В терминах фрактальной модели это означает, что слаболокализованные солитоны, устойчивые в достаточно прямых цепочках, теряют устойчивость при переходе цепочки к клубкообразной конформации, что должно сопровождаться существенным изменением её транспортных свойств. В последнем подразделе пятого раздела используется квазиконтинуальное приближение и показывается, что в случае $s = 2$ уравнение движения становится похожим на уравнение Бенджамена–Оно: как и последнее, оно записывается в терминах преобразования Гильберта и имеет решения в виде алгебраических солитонов. Завершается третья глава заключительным шестым разделом, где обсуждаются эффекты, к которым по результатам главы должен приводить учёт дисперсионной нелокальности межмолекулярных взаимодействий в реальных молекулярных цепочках.

В конце диссертации перечисляются основные результаты диссертационной работы.

Основные результаты работы, выносимые на защиту

1. Исследован характер взаимодействия акустического и давыдовского солитонов в ангармонических молекулярных цепочках и показано, что существует такое критическое значение ангармонизма, при котором взаимодействие между ними фактически отсутствует. При более слабом ангармонизме солитоны отталкивают друг друга, а при более сильном они начинают притягиваться и образуют осциллирующее связанное состояние. Исходя из оценок параметров реальных систем, делается вывод, что такое связанное состояние может возникать в проблеме нелинейного переноса избыточного заряда вдоль молекул белка в виде *электросолитона*. При этом, такое связанное состояние будет резонансно взаимодействовать с переменным электрическим полем и приводить, таким образом, к экспериментально наблюдаемым эффектам.

2. Предложено одномерное континуальное нелокальное нелинейное уравнение Шредингера (НЛ–НУШ), адекватно описывающее системы с насыщением закона дисперсии плоских волн. Детально изучены его неподвижные стационарные солитонные решения и показано, что эти решения существуют только в ограниченном интервале значений нормы волновой функции, причём если значение нормы близко к максимальному, то существуют две ветви стационарных решений, одна из которых является неустойчивой. При этом форма солитона изменяется, при увеличении значения нормы, от колоколообразной до обострённой. Если норма превышает максимальное значение, то стационарного решения не существует и любое достаточно сильно локализованное начальное возбуждение коллапсирует. Показано, что вследствие неинвари-

антности системы по отношению к преобразованиям Галилея, в ней отсутствуют движущиеся стационарные солитонные решения, — при движении солитон будет непертурбативно излучать позади себя хвост с длиной волны, пропорциональной скорости солитона.

3. Предложено одномерное дискретное нелокальное нелинейное уравнение Шрёдингера со степенным характером дисперсионной нелокальности, которое позволяет описать диполь–дипольное и другие виды мультипольного резонансного межмолекулярного взаимодействия и учесть при этом, в рамках фрактальной модели, пространственную конфигурацию молекулярной цепочки. Показано, что при быстром ослаблении интенсивности нелокального межмолекулярного взаимодействия с расстоянием, переход от слаболокализованных солитонов к сильнолокализованным происходит плавно и, таким образом, свойства системы не отличаются от её свойств в приближении ближайших соседей. Если же нелокальное взаимодействие ослабляется с расстоянием достаточно медленно, то существует интервал значений нормы, где сосуществуют два вида солитонов (слабо- и сильнолокализованные) и система является, таким образом, бистабильной. Существование явления бистабильности в дискретном НЛ–НУШ является результатом конкуренции между двумя масштабами длины системы: расстояния между молекулами, с одной стороны, и эффективного радиуса нелокального взаимодействия, с другой.

4. Показано, что при уменьшении показателя степени нелокальности, s, дискретного НЛ–НУШ со *степенной* нелокальностью, слаболокализованное солитонное состояние сначала уширяется, а затем исчезает (при $s = 2$), так что устойчивым становится экситонное (делокализованное) состояние. Учитывая, что эффективное значение показателя степени нелокальности изменяется при

конформационных переходах молекулярной цепочки, можно ожидать резкое изменение основного состояния цепочки и, таким образом, её транспортных свойств, во время этих переходов.

5. Рассмотрен квази-континуальный вариант дискретного НЛ–НУШ со *степенной* нелокальностью и показано, что это уравнение переходит в обычное НУШ при больших показателях степени нелокальности, $s > 3$, и редуцируется к уравнению "Гильберт–НУШ", близкому аналогу уравнения Бенджамена–Оно, при $s = 2$. Показано, что в одном частном случае Гильберт–НУШ имеет решение в виде алгебраического солитона.

Материалы диссертации опубликованы в следующих работах:

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

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

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

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

5. С.Ф. Мингалеев, *Связанное состояние Давыдовского и Акустического солитонов в сильноангармонических цепочках*, Труды Всеукраинской конференции молодых учёных (физика), Киевский университет, (апрель 1994) 17–24.

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

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

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

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

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

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

Ключевые слова: ангармоническая молекулярная цепочка, дисперсионная нелокальность, коллапс, мультистабильность, нелинейное уравнение Шрёдингера, одномерность, система Энона-Элиса, солитон.

Мингалеев Сергей Фёдорович

Эффекты дальнодействия и ангармонизма в нелинейном транспорте энергии и заряда. (Автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук.)

Зам.-3	Формат $60 \times 90/16$	Обл.-вид.арк. – 1.0
Подписано в печать 10.01.1997 г.		Тираж 100 экз.

Полиграфический отдел ИТФ им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины.