

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиофизики и нелинейной динамики

**Взаимодействие солитонов и электронов в цепочке нелинейно
связанных частиц**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 4061 группы

направления 11.03.02 Инфокоммуникационные

технологии и системы связи

Института физики

Агапкина Ильи Артемовича

Научный руководитель

Доцент, д.ф.-м.н.,

К.С. Сергеев

Зав. кафедрой радиофизики

и нелинейной динамики

д.ф.-м.н., доцент

Г.И. Стрелкова

Саратов 2023 г.

Введение

В настоящее время активно изучаются проблемы транспортировки энергии и заряда в упорядоченных структурах. Ученые изучают процессы, протекающие в биологических макромолекулах, которые в теории представляют собой набор цепочек связанных идентичных элементов.

Распространённая модель имеет вид упорядоченного одномерного ансамбля точечных заряженных частиц, связанных потенциальными силами. Примером может являться потенциал Морзе. С возмущениями, распространяющимися в такой цепочке, могут взаимодействовать заряженные частицы - электроны. Если энергия возмущений достаточно высока, то проявляются нелинейные свойства потенциала Морзе, ведущие, например, к формированию движущихся локализованных возмущений - солитонов. При межузловых потенциалах Морзе, существует возможность распространения нелинейных искажений кристаллической решетки в виде солитоноподобных волн. Это такие волны, которые могут распространяться сверхзвуковым образом вдоль цепочки, при этом сохраняя свою форму без изменения.

Солитон в цепочке заряженных частиц формирует потенциальную яму, в которую может захватываться электрон. Тем самым формируется связанное состояние "солитон-электрон", также известное как «солектрон» [1].

Напомним, что солитон — это структурно устойчивая уединённая волна в нелинейной диспергирующей среде, которая сохраняет свою форму и скорость неизменной при распространении. Данная способность солитона объясняется тем, что его поведение определяется двумя действующими взаимно противоположно процессами: это нелинейность, вызывающая укрупнение фронтов, и дисперсия, ведущая к тому, что волна расплывается. Таким образом, нелинейное укрупнение волны компенсируется ее расплыванием за счет дисперсии, что обеспечивает сохранение формы волны при ее распространении.

Характерные особенности масштабов изучаемых систем таковы, что цепочка тяжелых частиц (ионов) может описываться законами классической

механики, а легкий электрон должен рассматриваться с точки зрения квантовой физики. Поэтому анализ системы является полуклассической (полуквантовой) задачей и обычно проводится с помощью так называемой модели "сильной связи", в рамках которой состояние электрона описывается дискретной волновой функцией, определенной в точках локализации частиц цепочки.

Целью данной работы является изучение эволюции нелинейных возмущений в цепочке и волновой функции электрона, сначала в отсутствие их взаимодействия, а потом и при взаимодействии.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- (1) установить границу между солитроном и поляроном в пространстве параметров, отвечающих за связь цепочки с электроном
- (2) определить влияние на границу между солитроном и поляроном частоты он сайт колебаний.

В главе 1 приводятся известные сведения из статьи о Солитонах в нелинейных цепочках Тоды

В главе 2 описываются исследуемая модель и полученные численные результаты.

Принимая во внимание большое несоответствие между большой массой единиц решетки по отношению к гораздо меньшей массе электрона, мы будем рассматривать смешанную классическо-квантовую модель. Классификационная часть будет учитывать ньютоновскую динамику и эволюцию кристаллической решетки в их допустимых колебаниях на месте и в их относительных движениях (межсайтовое удлинение/изменения связи). Как обычно в этом широко используемом типе молекулярной динамики, классическое движение основано на приближении Эренфеста [1], позволяющем определить силу, действующую на ядра из производной энергии. Однако этот подход может быть подвергнут сомнению, поскольку он может привести к недооценке поляронного расширения или к описанию

возбужденных электронных состояний. Однако в данном случае мы по-прежнему считаем, что подход Эренфеста может охватить основные особенности процесса, поскольку мы имеем дело с низкоэнергетическими возбуждениями без электронного компонента.

Мы оцениваем энергию солитрона, исходящую в основном из солитонной части, примерно в 1,3 эВ, что намного ниже, чем типичные энергии для возбужденных электронных состояний, таких как экситоны Френкеля. Кроме того, из-за сложности молекулы было бы слишком много вибрационных мод, которые нужно было бы объединить, чтобы получить полное квантовое описание. В отличие от ядер, динамика избыточных электронов следует эволюции Шредингера на дискретном носителе кристаллической решетки с использованием приближения Хюккеля (ТВА в физике твердого тела). Таким образом, принцип состоит в том, чтобы классически описывать единицы по их потенциальной и кинетической энергии, но электроны квантово-механически, т. е. они характеризуются своей полной энергией без разложения на потенциальную и кинетическую энергию. Для иллюстрации и с учетом замечаний, сделанных во введении, мы сосредоточим внимание на динамическом анализе связи, с учетом подхода Маркуса. Исходя из его известной структуры, проиллюстрированной на рис. 1, мы определяем сайт (или элементарную ячейку) как группу C4R2 (сокращенно C4). Избыточный электрон добавляется для генерации носителя заряда.

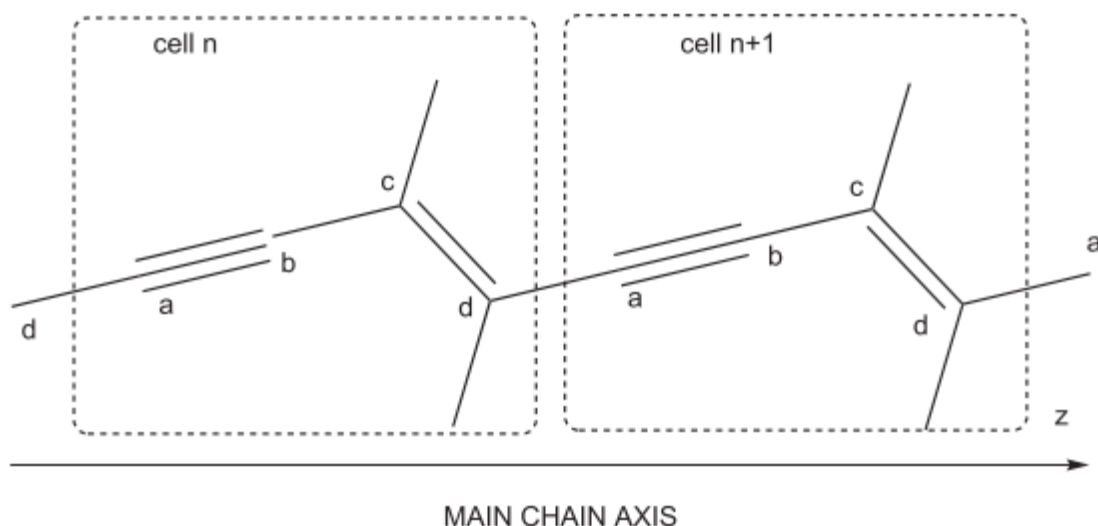


Рис. 1. Элементарная ячейка представляет собой блок с атомами углерода с чередованием одинарных и кратных (двойных или тройных) связей. Атомы углерода, обозначенные (c) и (d), несут объемные заместители R.

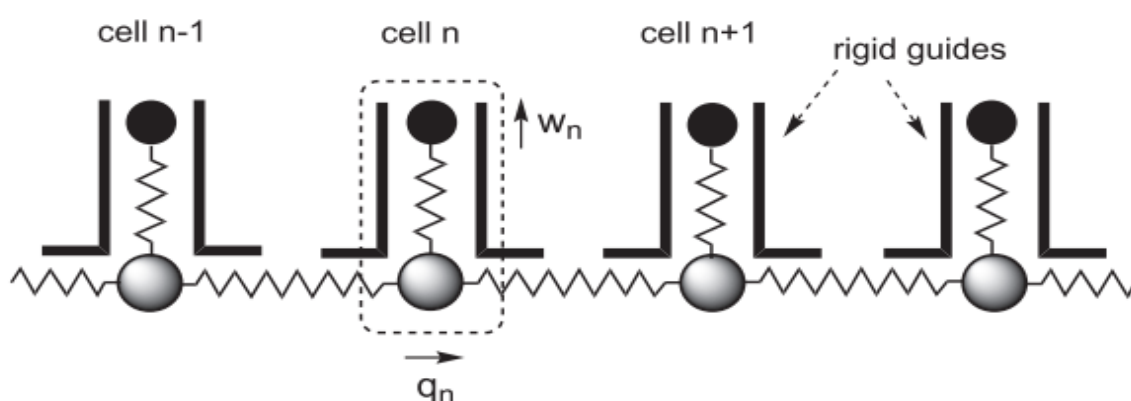


Рис. 2. Схематический механический аналог мостовой модели кристаллической решетки, допускающей как изменение расстояний между сайтами (интер-сайт колебания), так и он-сайт-осцилляции. При прохождении солитона вдоль главной (горизонтальной) оси n-я ячейка перемещается как единое целое. Изменение w_n на месте здесь берется независимо от изменения q_n

Основные уравнения, описываемые модель изображенную на (рис 2):

$$\frac{d^2 q_n}{dt^2} = [1 - e^{(q_n - q_{n+1})}] e^{(q_n - q_{n+1})} - [1 - e^{(q_{n-1} - q_n)}] e^{(q_{n-1} - q_n)} \quad (1)$$

$$+ 2aV [Re(C_{n+1}C_n^*)e^{a(q_n - q_{n+1})} - Re(C_n C_{n-1}^*)e^{a(q_{n-1} - q_n)}]$$

Уравнение (1) описывает движение элементов кристаллической решетки вдоль оси молекул, так называемые интер сайт колебания.

Далее рассмотрим формулу, отвечающую за он сайт колебания:

$$\frac{dg_n}{dt} = -A_1 |C_n|^2 e^{-i\omega_f t} \quad (2)$$

$$g_n = \left(\frac{dw_n}{dt} + i\omega_f w_n \right) e^{-i\omega_f t} \quad (2a)$$

Далее формула по которой считается вероятность нахождения электрона на n сайте:

$$\frac{dg_n}{dt} = i\tau \left[C_{n+1} e^{a(q_n - q_{n+1})} + C_{n-1} e^{a(q_{n-1} - q_n)} \right] - i \frac{A_2 C_n}{\omega_f} Im(g_n e^{i\omega_f t}) \quad (3)$$

2.2 Результаты численного интегрирования

Изучив изложенную в [3] математическую модель цепочки с он-сайт и интер-сайт колебаниями, мы провели собственные эксперименты. Уравнения (1,2,3) интегрировались численно методом Рунге-Кутты 4 порядка в программе на языке python.

Первой целью нашей работы было установить границу между солитоном и поляроном в пространстве параметров, отвечающих за связь цепочки с электроном

Зафиксировав значение $\omega = 3$ мы установили границу при следующих параметрах: $(A_1 = 5, A_2 = 110)$; $(A_1 = 4.5, A_2 = 130)$; $(A_1 = 4, A_2 = 150)$; $(A_1 = 3, A_2 = 190)$

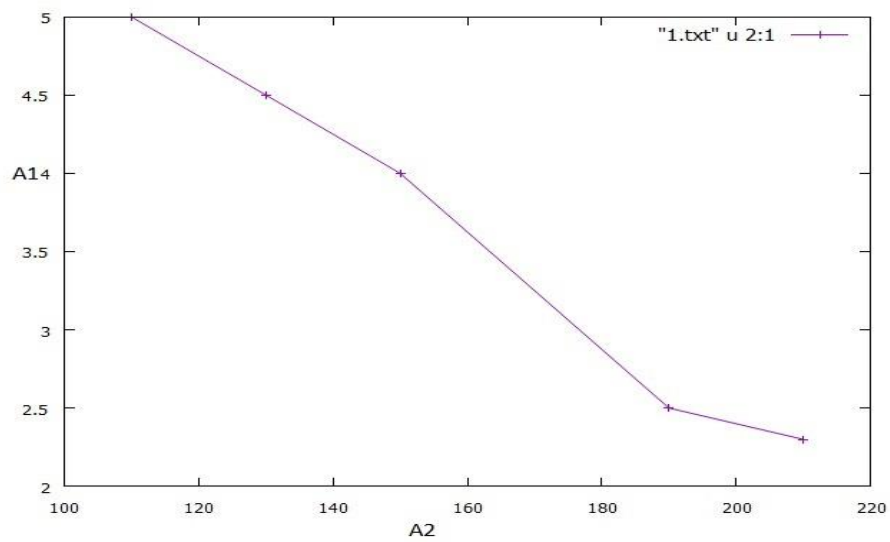


Рис. 3. Точки показывающие границу перехода. Параметры ($A1= 5, A2=110$); ($A1 = 4.5, A2 = 130$); ($A1 = 4, A2 = 150$); ($A1=3, A2=190$)

Для демонстрации возьмем значения ($A2 = 190$) изменяя параметр $A1$ мы имеем:

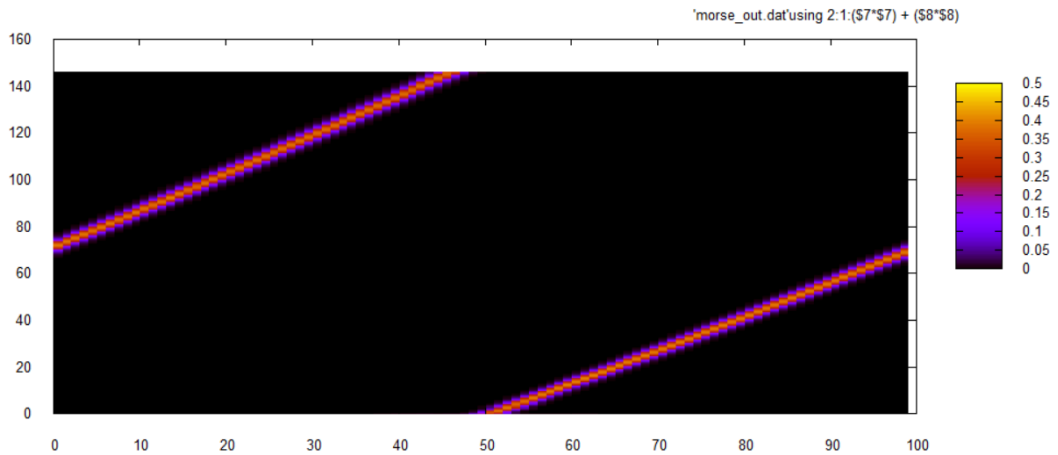


Рис. 4. Диаграмма, демонстрирующая поведение Солектрона с параметрами: $A1=2, A2=190$

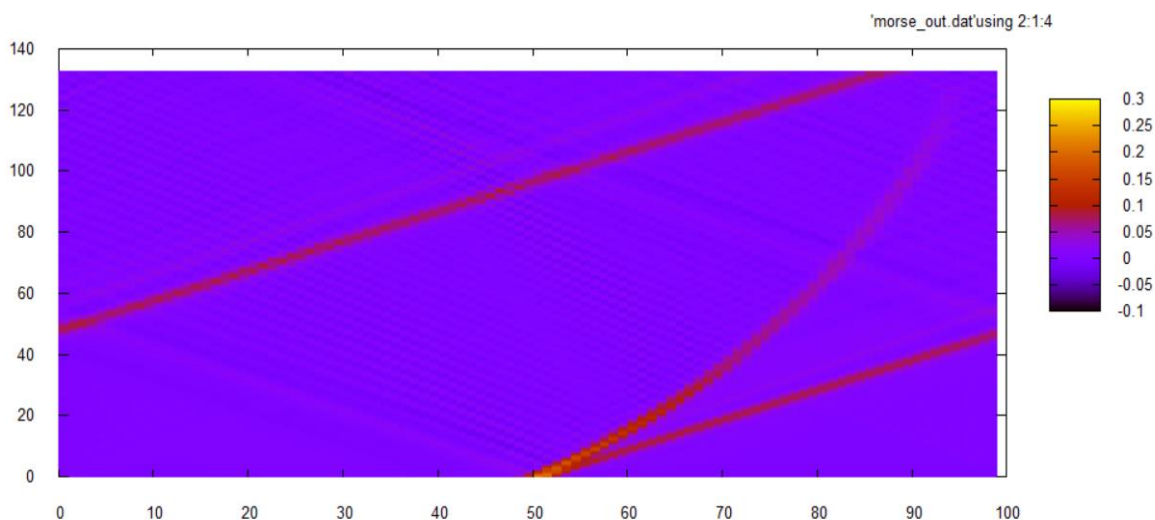


Рис. 5. Диаграмма, демонстрирующая механическую модель солектрона с параметрами: $A1=2$, $A2=190$

На рисунке 4, 5 при значении параметров ($A1=2$ $A2=190$) показан солектрон. Увеличивая $A2$ на 2, мы видим, как появляется полярон (рис.6, 7). При этом «механическая» часть модели демонстрирует распространение солитона, не связанного с электроном.

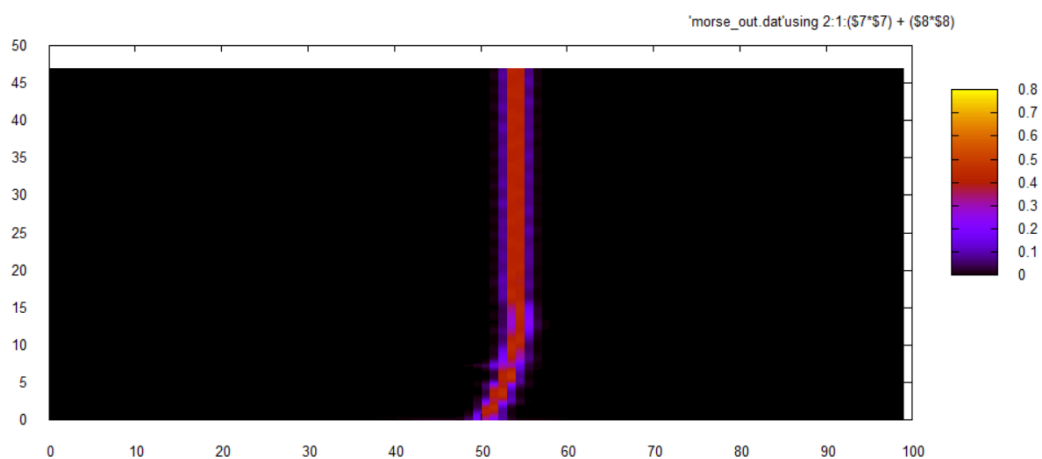


Рис.6. Диаграмма, демонстрирующая образование полярона. Параметры: $A1 = 4$, $A2 = 190$

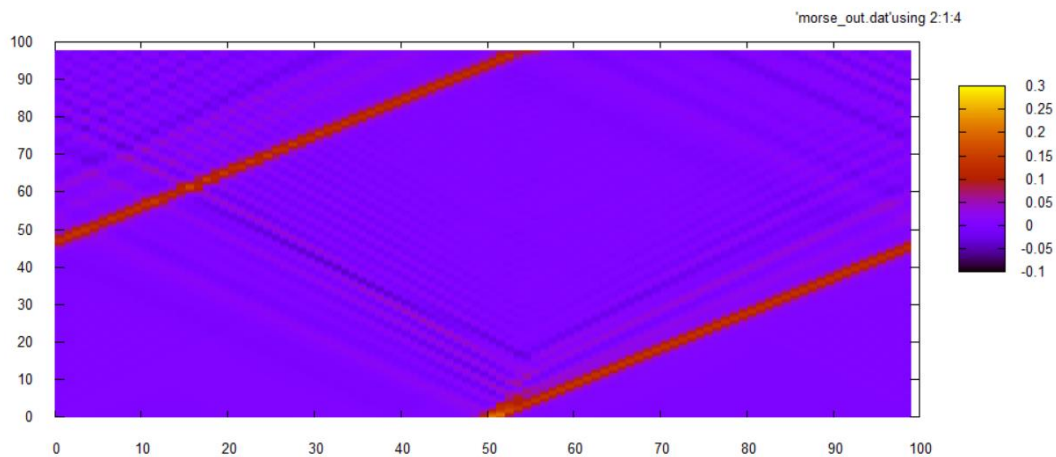


Рис. 7. Механическое изображение полярона. Параметры: $A_1 = 4$, $A_2 = 190$

Так же цель нашей работы было определить влияние на формирование полярона и солитрона частоты он сайт колебаний. Для этого мы взяли параметры возле границы между солитоном и поляроном ($A_1= 4$ $A_2 = 150$) и изменяли частоту ω_f :

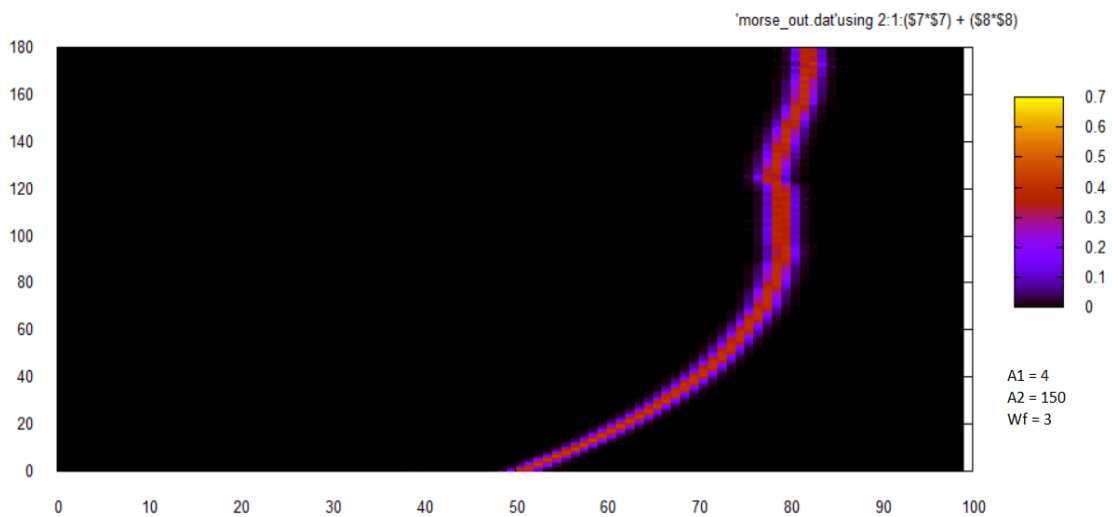


Рис. 8. Граница с параметрами ($A_1= 4$, $A_2= 150$, $W_f = 3$)

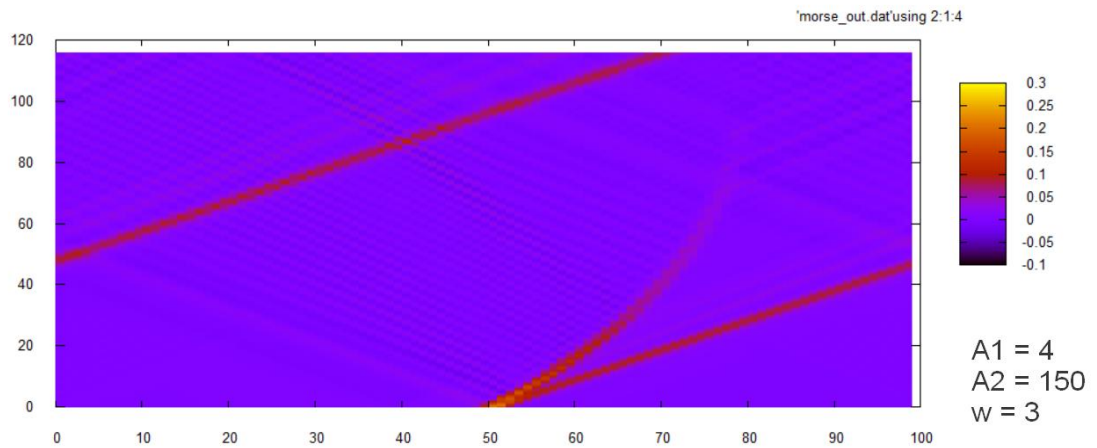


Рис. 9. «Механическая» части модели ($A_1= 4$, $A_2= 150$, $W_f = 3$)

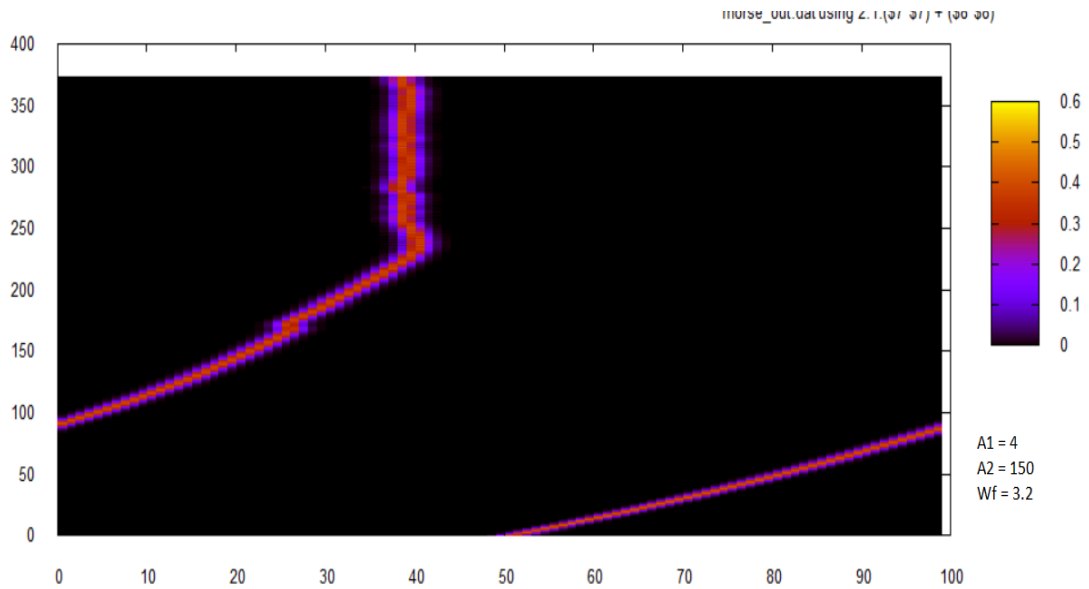


Рис. 10. Диаграмма, демонстрирующая Изменение границы при увеличении W_f ($A_1= 4$, $A_2= 150$, $W_f = 3.2$)

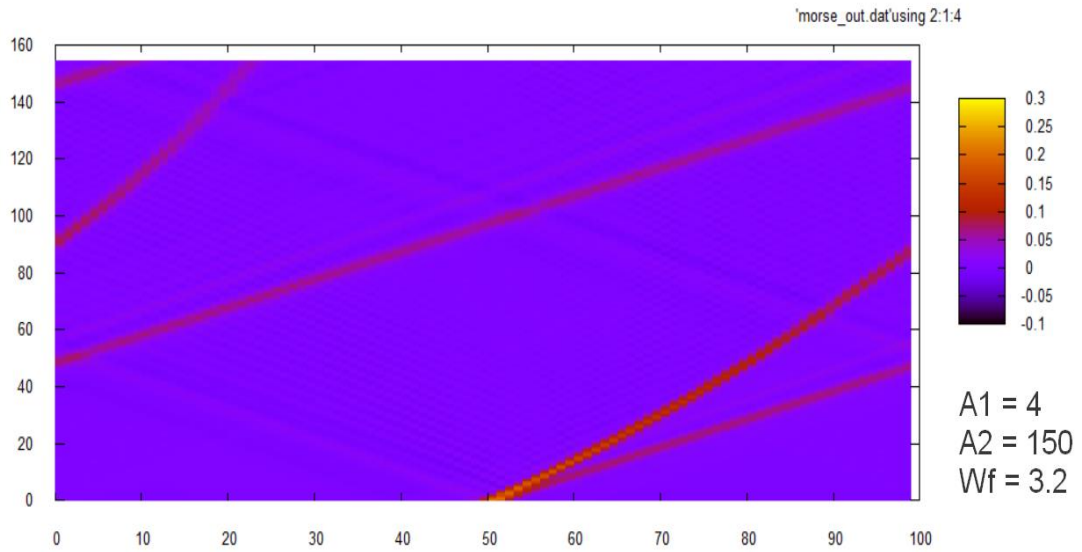


Рис. 11. Диаграмма, демонстрирующая поведение «Механической» части модели при увеличении W_f ($A_1= 4$, $A_2= 150$, $W_f = 3.2$)

Далее увеличивая параметр частоты W_f , становится видно как появляется устойчивое соединение «солектрон»

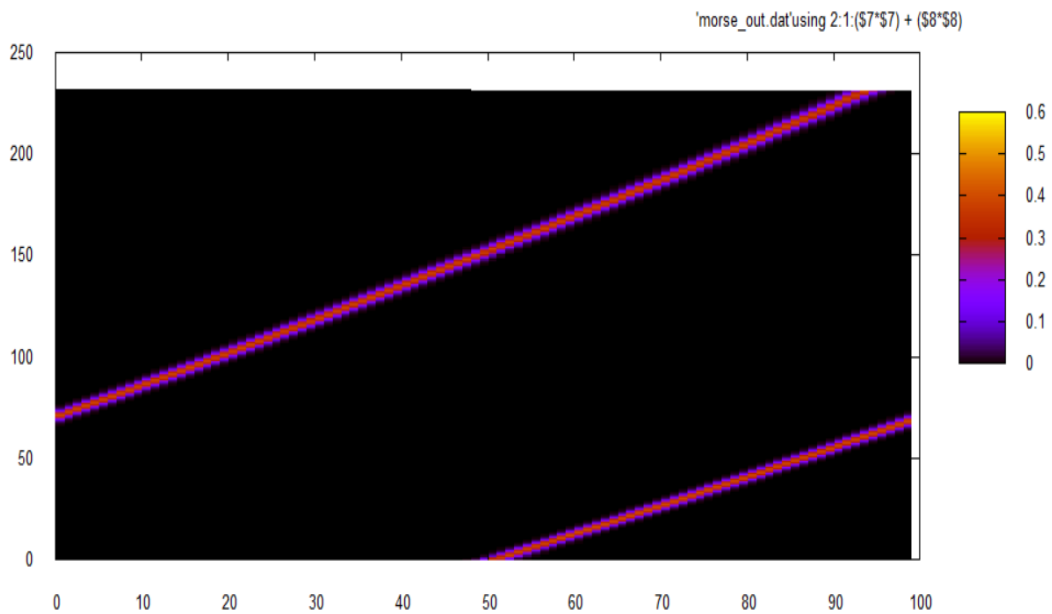


Рис. 12. Диаграмма, демонстрирующая поведение при изменении границы при увеличении W_f ($A_1= 4$, $A_2= 150$, $W_f = 3.2$)

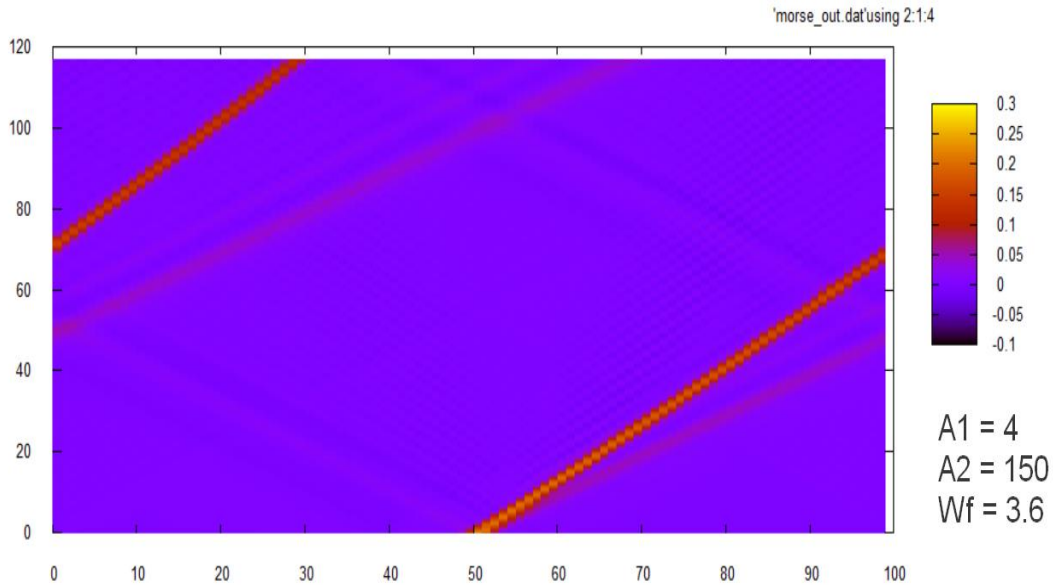


Рис. 13. Диаграмма, демонстрирующая поведение «механической» части модели (с параметрами рис. 2.10)

Видно, как приближаясь к значению $Wf = 4$ система принимает состояния солектрона. Далее будем уменьшать частоту. Начиная с $wf=2.9$ (см рис) видим формирование полярона. Таким образом уменьшение частоты Wf приводит к плавному переходу от солектрона к полярону. Отметим, что этот переход осуществляется плавно, не сопровождаясь явлениями резонанса. Процесс перехода проиллюстрирован на рис. 2.11

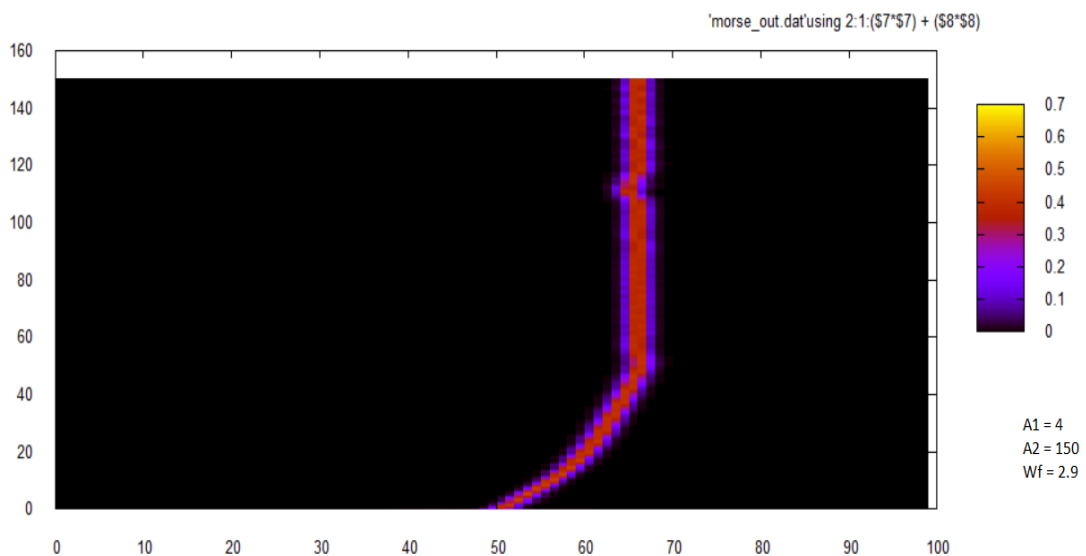


Рис. 14. Диаграмма, демонстрирующая изменение границы при уменьшении W_f ($A_1 = 4$, $A_2 = 150$, $W_f = 2.9$)

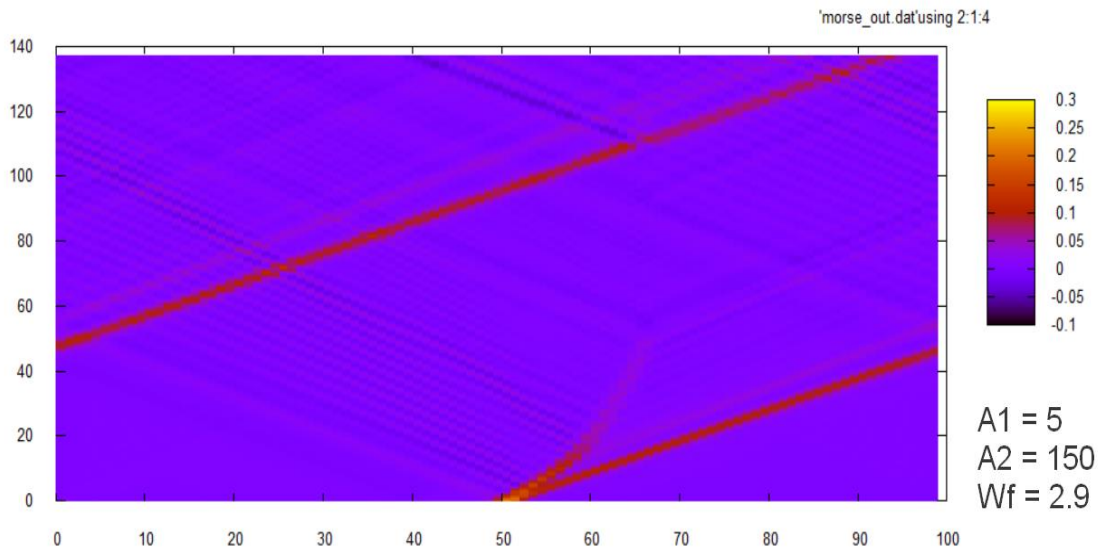


Рис. 15. Диаграмма, демонстрирующая поведение «механической» части модели (с параметрами рис. 2.11)

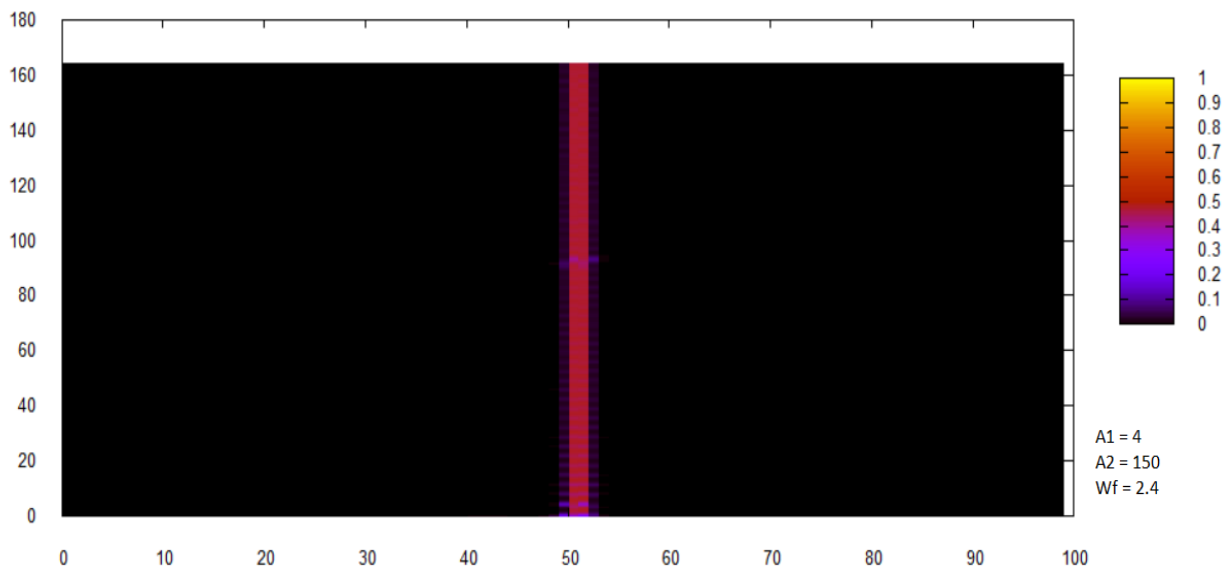


Рис. 16. Диаграмма, демонстрирующая поведение границы при уменьшении W_f ($A_1 = 4$, $A_2 = 150$, $W_f = 2.4$)

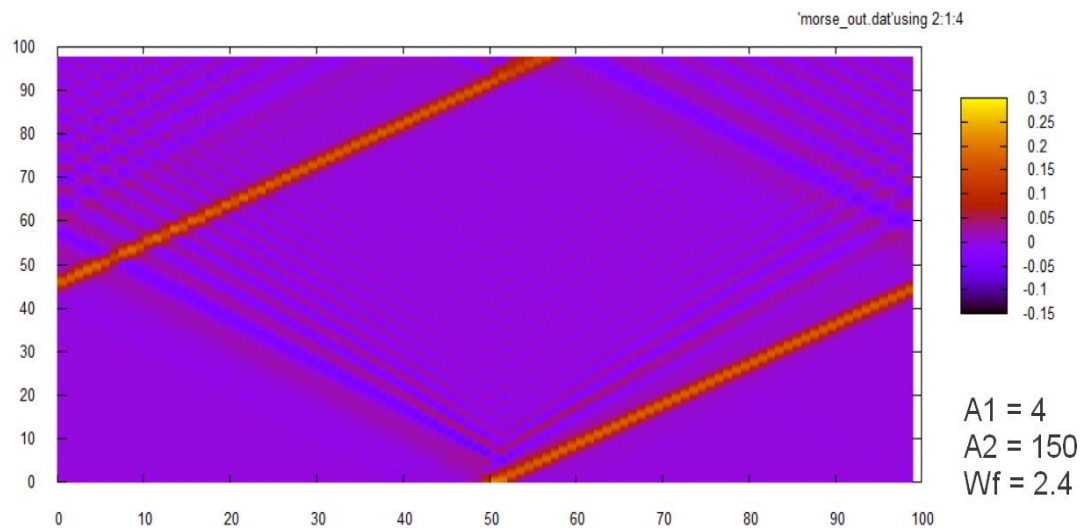


Рис. 17. Диаграмма, демонстрирующая поведение «Механической» части модели (с параметрами рис. 2.12)

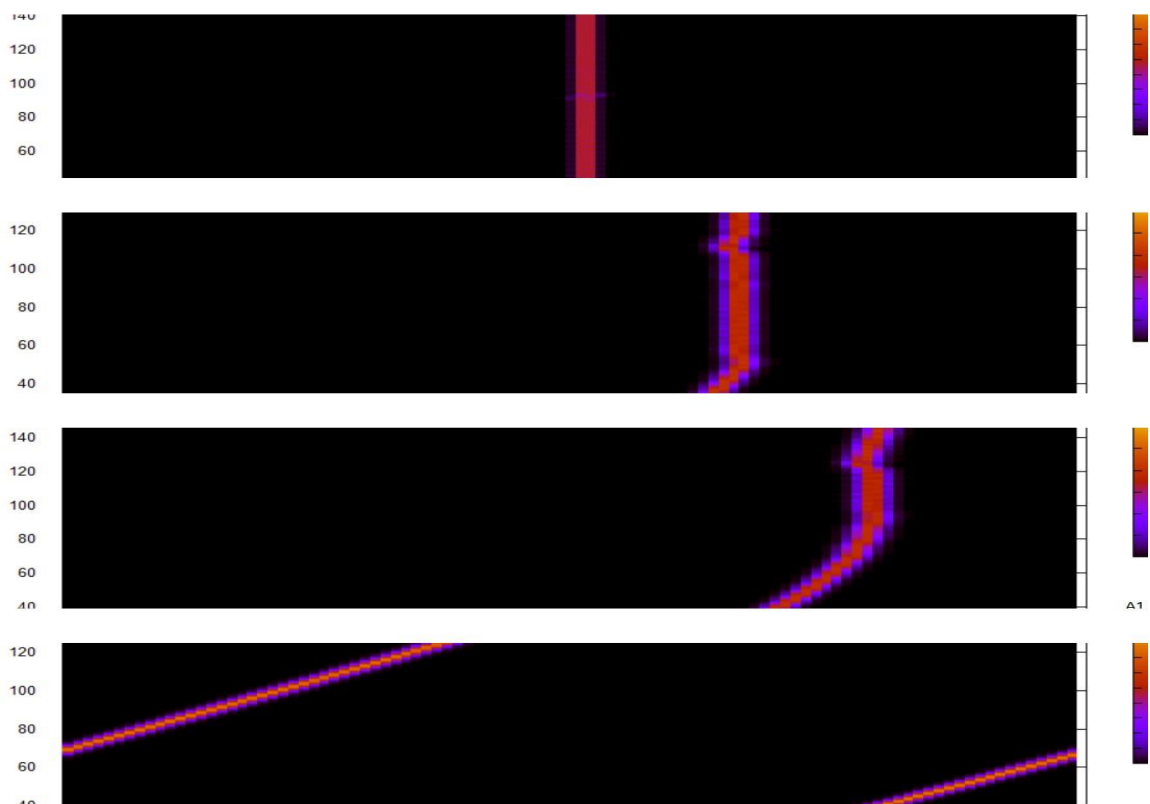


Рис. 18. Изменение системы по убыванию W_f , сверху вниз (2.12; 2.11; 2.8; 2.10)

Заключение

После рассмотрения модели, которая имеет вид упорядоченного одномерного ансамбля точечных заряженных частиц, связанных потенциальными силами. Примером может являться потенциал Морзе. С возмущениями, распространяющимися в такой цепочке, могут взаимодействовать заряженные частицы - электроны. Если энергия возмущений достаточно высока, то проявляются нелинейные свойства потенциала Морзе, ведущие, например, к формированию движущихся локализованных возмущений - солитонов.

Поставленная цель была достигнута. Мы опровергли гипотезу, в которой говорилось, что при переходе от полярона к солитрону возникает резонанс. Исследовав модель, стало ясно что уменьшение частоты ω_f приводит к плавному переходу от солитрона к полюрону, не сопровождающимся явлениями резонанса.

Была определена граница между солитроном и полюроном в пространстве параметров $A_1 A_2$. С ростом значения A_2 , граничное значение A_1 монотонно убывает.

Список литературы

1. М. Тода. Теория нелинейных решёток. Пер. с англ. М.: Мир, 1984
2. А.С. Давыдов. Квантовая механика М:1976
3. Andrew J. Jenkins; K. Eryn Spinlove; Morgane Vacher; Graham A. Worth; Michael A. Robb. He Ehrenfest method with fully quantum nuclear motion (Qu-Eh): Application to charge migration in radical cations. 07.09.2018
4. J. C. Slater, Quantum Theory of Molecules and Solids (McGraw-Hill, New York, (1974), Vol. 4
5. Четвериков А.П. Сергеев К.С. Лахно В.Д. Захват и транспорт зарядов в ДНК мобильными дискретными бризерами
6. Dauxois T., Peyrard M., Bishop A.R. Phys. Rev. E. 1993. V. 47. P. 2755–2758
7. Lakhno V.D. J. Biol. Phys. 2000. V. 26. P. 133
8. T. Holstein, Ann. Phys. 8, 325 (1959); 8, 343 (1959); reprinted: 281, 706 (2000); 281, 725 (2000)
- 9.