U N I V E R Z I T E T   U   N O V O M   S A D U

PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

Природно-математички факултет
Радна заједница заједничких послова

Примљено:	27-05-1987		
Орг. јед.	Број	Прилог	Вредност
03	342/1		

Mr MAŠKOVIĆ D. LJILJANA

J E D N O S O L I T O N S K A   I   D V O S O L I T O N S K A S T A NJ A   U   J E D N O D I M E N Z I O N A L N I M S T R U K T U R A M A

-DOKTORSKA DISERTACIJA-

NOVI SAD 1987.

Ova teza je uradjena u Institutu za fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta u Novom Sadu.

Posebnu zahvalnost izražavam mentoru ove teze profesoru dr Stanoju Stojanoviću kao i svim članovima Laboratorije za teorijsku fiziku na čelu sa profesorom dr Bratislavom Tošićem.

S A D R Ž A J

ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
ДЕПАРТМАН ЗА ФИЗИКУ
БИБЛИОТЕКА
НОВИ САД

U V O D

U poslednjoj deceniji se veoma intenzivno ispituju udruženi talasi u kondenzovanim sredinama.Za razliku od običnih monohromatskih talasa koji predstavljaju beskonačne prostorno-vremenski periodične forme, udruženi talasi su paketi konačnih dimenzija i stabilnog oblika /1/.Potpuno je razumljivo da je običan ravan talas nepodesan za prenos energije,informacije i ostalih relevantnih fizičkih karakteristika,i da se procesi ovakvog prenosa daleko lakše mogu realizovati paketima konačnih razmera i stabilne forme /2/,pri čemu ovo poslednje obezbedjuje vernost prenosa i minimum gubitaka.

Upravo ovom činjenicom može se objasniti povišen interes za udružene talase i za nelinearne procese koji su neophodan uslov njihovog nastanka.Veran prenos informacije značajan je za veoma širok krug bioloških pojava,dok je minimum gubitaka pri prenosu i istraživanje mehanizama kojima se ovo može postići,jedan je od imperativa našeg vremena.

U disertaciji,prirodno,morala sam da se ograničim samo jednim uskim delom ove široke problematike i istraživanja su posvećena u prvom redu udruženim talasima koji nastaju u molekulskim lancima i koji se obično nazivaju Davidovljevim solitonima.

Istraživanja u disertaciji skoncentrisana su na tri grupe problema.

U prvu grupu problema ušla su neka fundamentalna pitanja teorije Davidovljevih solitona,koja do danas nisu rešena na zadovoljavajući način.Iako iz oblasti teorije Davidovljevih solitona danas postoji veoma veliki broj radova, neka pitanja ostaju otvorena.Ova pitanja bi se mogla formulisati na sledeći način:

a) Da li u okviru kvaziklasičnog prilaza treba koristiti Hamiltonov ili Lagranžev formalizam?

b) Da li čisto kvantni prilaz solitoskom problemu bitno menja zaključke koje daje kvaziklasična teorija?

c) Da li se u solitonskoj teoriji smeju koristiti normalna kvazičestična stanja ili se moraju koristiti koherentna stanja?

d) Kako eliminisati singularitete koji se pojavljuju u eksitonskom spektru?

Svakom od ovih pitanja sam posvetila posebnu pažnju.

Druga grupa problema je uglavnom metodološkog karaktera,jer u sadašnjoj etapi razvoja solitonske teorije ne postoje dovoljno dobro razradjeni metodi za ispitivanje efekata neodržanja, temperaturskih efekata, uticaja razdvajanja zona na karakteristike solitona itd. U grupu metodoloških pitanja svakako spada i problem analize vezanih solitonskih stanja i ispitivanje njihovih osobina. Ovim pitanjima je takodje posvećena posemna pažnja.

Treća grupa problema vezana je za ispitivanje nekih solitonskih specifičnosti koje bi mogle da nadju neposrednu primenu. Ovaj krug problema je veoma širok, pa je zbog toga u disertaciji obuhvaćen samo jedan njegov manji deo. Ispitivani su solitoni u α -proteinima /3,4,5/, koji bi trebalo da budu glavni nosioci energije i informacije u biološkim sistemima. Takodje su ispitivane transformacije tipa soliton-bisoliton pri čemu su dobijene neke opšte forme koje se mogu primenjivati za rešavanje praktično veoma važnih problema kao npr. zahvat elektrona solitonom i njegov superfluidni transfer.

Jedan deo istraživanja posvećen je solitonima u magnetnim i feromagnetnim materijalima.

G L A V A I

P R O B L E M I S O L I T O N S K E T E O R I J E

I 1. OSNOVNI TIPOVI NELINEARNIH DIFERENCIJALNIH JEDNAČINA

Dugi niz godina se pri opisivanju fizičkih pojava veoma uspešno koristio aparat linearne teorije.Opis klasično-mehaničkih pojava zasniva se na linearnim Njutnovim jednačinama,u osnovi klasične elektrodinamike ležale su linearne Meksvelove jednačine,dok se teorija kvantnih fenomena zasniva na linearnoj Šredingerovoj jednačini.Kvazičestične teorije u fizici čvrstog stanja takodje su se zasnivale na linearnim jednačinama,a različiti tipovi kvazičestica (eksitoni,fononi,spinski talasi,feroelektrična pobudjenja i dr.) predstavljali su ravne monohromatske talase,koji su imali strogo definisanu frekvenciju i talasnu dužinu.U okviru pomenutih linearnih teorija postignuti su značajni rezultati i veliki niz fizičkih fenomena je dobio svoje adekvatno teorijsko objašnjenje.Očigledno je medjutim da postoje pojave koje se ne mogu opisati linearnim jednačinama.Prve takve pojave primećene su u hidrodinamici,a zatim je niz nelinearnih fenomena primećen u drugim oblastima fizike.S tačke gledišta kvazičestičnih fenomena u čvtstim telima,u okviru linearne teorije nisu mogle da budu opisane pojave prenosa energije,informacije i drugih relevantnih veličina.Razlog za ovo je prost: ravni talasi (eksitoni,fononi i dr.) su beskonačni u prostoru i kao takvi nisu u stanju da išta saopštavaju nekakvom lokalizovanom prostornom domenu.U ovom smislu potpuno je jasno da za pomenute efekte transfera treba tražiti nešto što nije ravan talas,tj. takvo pobudjenje koje je lokalizovano u odredjenom delu prostora.S druge strane efekti lokalizacije ili obrazovanje talasnih paketa,mogu se opisati samo nelinearnim jednačinama.

Iz svih pomenutih razloga u poslednjoj deceniji je naglo poraslo interesovanje za nelinearne pojave i formulisan je niz nelinearnih jednačina koje su u stanju da pojave lokalizacije verno opišu.

Još u prošlom veku (1834 god.)primećen je vodeni talas koji je imao nepromenljivu formu i koji se kretao odredjenom brzinom /1/.Morski talasi poznati pod imenom cunami,takodje su talasi manje-više stalne forme i konačnih razmera i nemaju sličnosti sa običnim talasanjem koje se sastoji u periodičnom prostorno-vremenskom ponavljanju uzvišenja i udubljenja.Talasi konstantne forme i konačnih razmera, nazvani su za razliku od običnih talasa "udruženim talasima",a mnogo kasnije,pojavio se danas uobičajeni termin - soliton - /6/ za talase ovog tipa.

Jednačina za matematičko opisivanje "udruženih talasa" na vodi predložena je još 1895 godine i nosi naziv jednačina Korteweg de Vries-a /7/ (KDV).Ova jednačina ima oblik:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \beta \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0 , \quad u = u(x,t) . \qquad (\text{I } 1.1)$$

U jednačini veličina $u(x,t)$ predstavlja srednju brzinu kretanja vode,dok je β parametar teorije,koji se bira od slučaja do slučaja.

Striktno govoreći jednačina KDV opisuje kretanje tečnosti u plitkim kanalima,ali je kasnije ona primenjivana i u mnogim drugim problemima fizike kao što su ispitivanje jonskoakustičnih talasa,magnetohidrodinamičkih talasa u plazmi,akustičnih talasa u anharmonijskoj rešetki itd. /9-21/.

U vezi sa ponašanjem sistema medjusobno povezanih klatana čije oscilacije ne moraju da budu male pojavila se takozvana sinusoidalna Gordonova jednačina oblika:

$$\frac{\partial^2\theta}{\partial t^2} - v_0^2\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} = \Omega^2 \sin\theta , \quad \theta = \theta(x,t) \tag{I 1.2}$$

gde je θ ugao odstupanja od ravnotežnog položaja i v_0 neka karakteristična brzina sistema.Kasnije se ispostavilo da se mnogi nelinearni problemi u teoriji superprovodljivosti (Džozefsonov efekat,npr.) i u teoriji feromagnetizma mogu svesti na jednačinu tipa (I 1.2) /22-30/.

Analize "udruženih talasa" u plazmi dovele su do nelinearne Šredingerove jednačine /8/ koja ima oblik:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + G|\Psi|^2\Psi = 0 , \tag{I 1.3}$$

$$\Psi = \Psi(x,t) ,$$

gde Ψ predstavlja amplitudu talasa, G je parametar nelinearnosti i $\frac{\hbar^2}{2m}$ karakteriše disperziju talasa. Ova jednačina je kasnije našla primenu u mnogim oblastima fizike, a naročito u nelinearnoj optici (problemi samofokusiranja) i u teoriji kvazičestičnih talasnih paketa / 2,3,31 /.

Analizi nelinearne Šredingerove jednačine i njenim primenama biće posvećen materijal ove disertacije, pa se zato ovde na njoj nećemo zadržavati. Nešto prostora posvetićemo jednačinama (I 1.1) i (I 1.2) i izložićemo neke najprostije tipove rešenja.

Jednačina (I 1.1) se najprostije rešava uvodjenjem združene promenljive:

$$\xi = (x - vt), \quad u(x,t) \rightarrow u(\xi), \tag{I 1.4}$$

gde je v -parametar koji očigledno ima dimenzije brzine. Smena (I 1.4) prevodi nelinearnu parcijalnu jednačinu (I 1.1) u nelinearnu običnu diferencijalnu jednačinu trećeg reda:

$$\frac{d^3u}{d\xi^3} + \frac{1}{\beta} u \frac{du}{d\xi} - \frac{v}{\beta} \frac{du}{d\xi} = 0 . \tag{I 1.5}$$

Uvodjenjem smene $\frac{du}{d\xi} = W$, jednačina (I 1.5) svodi se na oblik:

$$\frac{du}{\sqrt{a + bu + \frac{v}{\beta}u^2 - \frac{1}{3\beta}u^3}} = d\xi , \tag{I 1.6}$$

i ovde je očigledno da se problem nalaženja brzine u svodi na rešavanje i inverziju eliptičnog integrala prve vrste.

Ovde ćemo razmatrati najprostiji tip rešenja uzimajući da su proizvoljne integracione konstante u (I 1.6) $a = b = 0$ .Na taj način dolazimo do relacije:

$$\int \frac{du}{u\sqrt{3v - u}} = \frac{\xi}{\sqrt{3\beta}} \, . \tag{I 1.7}$$

Ako se u integralu izvrši zamena promenljive $3v - u = \frac{1}{z^2}$,rešenje se lako nalazi i ima oblik:

$$u(\xi) = 3v \frac{1}{ch^2 \xi \sqrt{\frac{v}{\beta}}} \, . \tag{I 1.8}$$

Ova "zvonasta" forma rešenja koja se pojavljuje i kod nelinearne Šredingerove jednačine odražava lokalizaciju koja je došla usled nelinearnosti.

U sinusoidalnoj Gordonovoj jednačini rešenje se takodje može tražiti uvodjenjem združene promenljive:

$$\xi = x - vt \, , \quad \theta(x,t) \rightarrow \Theta(\xi) \, , \tag{I 1.9}$$

gde je v -parametar sa dimenzijom brzine.Posle zamene (I 1.9) u (I 1.2) dolazi se do relacije:

$$\frac{d\Theta}{\sqrt{C - \frac{2\Omega^2}{\vartheta^2 - \vartheta_0^2}\cos\Theta}} = d\xi , \qquad \text{(I 1.10)}$$

odakle se vidi da se problem nalaženja veličine Θ svodi kao i u prethodnom slučaju na inverziju eliptičnog integrala. Ovde ćemo razmatrati dva slučaja.

Uzećemo $\vartheta_0^2 > \vartheta^2$ i $C = \frac{2\Omega^2}{\vartheta_0^2 - \vartheta^2}$. Tada se (I 1.10) svodi na:

$$\int \frac{d\Theta}{\sqrt{1 + \cos\Theta}} = \pm \xi \frac{\Omega\sqrt{2}}{\sqrt{\vartheta_0^2 - \vartheta^2}} , \qquad \text{(I 1.11)}$$

i rešenje ima oblik:

$$\Theta(\xi) = \pm 4 \operatorname{arctg}\left(th \frac{\Omega \xi}{2\sqrt{\vartheta_0^2 - \vartheta^2}} \right), \; |\Theta| < \pi . \qquad \text{(I 1.12)}$$

Očigledno je da ovakvo rešenje odgovara oscilovanju sistema klatana sa proizvoljno velikim amplitudama.

U drugom slučaju, kada je $\vartheta^2 > \vartheta_0^2$ i $C = \frac{2\Omega^2}{\vartheta^2 - \vartheta_0^2}$ dolazi se do relacije:

$$\int \frac{d\Theta}{\sqrt{1-\cos\Theta}} = \pm \xi \frac{\Omega\sqrt{2}}{\sqrt{v^2-v_0^2}} \,, \tag{I 1.13}$$

što daje rešenje:

$$\Theta(\xi) = 4 \operatorname{arctg} e^{\pm \frac{2\Omega\xi}{\sqrt{v^2-v_0^2}}} \,. \tag{I 1.14}$$

Ovaj tip rešenja je češći u primenama i nosi naziv kink, odnosno antikink,pri čemu kink odgovara znaku +, a antikink znaku -, u eksponentu.Iz (I 1.14) lako je zaključiti da kink (antikink) nema "zvonastu" formu,što znači da nelinearne teorije ne operišu samo sa zvonastim paketima,kao što se to,pogrešno,ponekad misli.

I 2. KVAZIKLASIČNA TEORIJA SOLITONA

Osnove teorije solitona dao je Davidov u nizu radova /2,3,4,32-40/.Otuda se u literaturi ovi solitoni nazivaju Davidovljevi solitoni.Ovde ćemo izložiti Davidovljevu teoriju solitona.

U okviru ove teorije posmatra se hamiltonijan interagujućih eksitona i fonona u jednodimenzionom molekulskom lancu,uzima se aproksimacija najbližih suseda i pretpostavlja se da eksitoni imaju pozitivnu efektivnu masu.Eksitonski hamiltonijan sistema uzima se u harmonijskoj aproksimaciji /41,42/ ,što znači da su eksitonski operatori zamenjeni Boze-operatorima i da je zadržan onaj deo eksitonskog hamiltonijana koji je kvadratan po eksitonskim operatorima.

U skladu sa ovim hamiltonijan posmatranog sistema se može napisati u obliku:

$$H = H_e + H_p + H_{ep} \quad , \qquad \text{(I 2.1)}$$

gde je:

$$H_e = H_{oe} + \Delta \sum_n B_n^+ B_n - R \sum_n B_n^+ (B_{n+1} + B_{n-1}) \ ,$$

$$H_{oe} = N\mathcal{E}_o - \frac{1}{2}\sum_{nm} V_{nm}(0000), \quad \Delta = \mathcal{E}_f - \mathcal{E}_o + 2D, \tag{I 2.2}$$

hamiltonijan eksitonskog podsistema,

$$H_p = \frac{1}{2M}\sum_n p_n^2 + \frac{Q}{2}\sum_n (u_n - u_{n-1})^2, \tag{I 2.3}$$

hamiltonijan fononskog podsistema,i

$$\begin{aligned} H_{ep} = J_R \sum_n (B_n^+ B_{n-1} + B_{n-1}^+ B_n)(u_n - u_{n-1}) - \\ - J_D \sum_n B_n^+ B_n (u_{n+1} - u_{n-1}), \end{aligned} \tag{I 2.4}$$

$$J_D = N^{-1}\sum_k k R_k \sin ak \;, \quad J_D = N^{-1}\sum_k k D_k \sin ak \;,$$

hamiltonijan eksiton-fonon interakcije, uzet u linearnoj aproksimaciji po molekulskim pomerajima u .Oznake upotrebljene u gornjim formulama su: $\mathcal{E}_f$ i $\mathcal{E}_o$ su energija pobudjenog i osnovnog stanja izolovanog molekula,respektivno, V, D i R su matrični elementi dipol-dipolne interakcije uzeti za najbliže susede /43/,pri čemu je $R > 0$ (eksitoni imaju pozitivnu efektivnu masu), N je broj molekula u kristalu, M je masa molekula, p je impuls molekula, Q je konstanta sile i a je konstanta rešetke.Operatori p i u zadovoljavaju komutacione relacije $[u_n, p_m] = i\hbar\,\delta_{nm}$, dok Boze-operatori B^+ i B kreiraju i anihiliraju eksitone.

Bitan element u Davidovljevom prilazu je uvodjenje funkcija:

$$|D(t)\rangle = \sum_n A_n(t) B_n^+ e^{-i\hat{S}(t)} |0_e\rangle |0_p\rangle \quad , \tag{I 2.5}$$

gde su $|0_e\rangle$ i $|0_p\rangle$ eksitonski i fononski vakum,respektivno, i $A_n(t)$ amplitude normalnih eksitonskih jednočestičnih stanja.Operator $\hat{S}(t)$ je dat izrazom:

$$\hat{S}(t)=\frac{1}{\hbar}\sum_n\left[\beta_n(t)p_n-\pi_n(t)u_n\right],\quad \hat{S}^+=\hat{S}\ , \tag{I 2.6}$$

gde su β i π realne funkcije položaja i vremena.Kao što se vidi funkcija $|D(t)\rangle$ predstavlja proizvod normalnog jednočestičnog eksitonskog stanja i koherentnog fononskog stanja:

$$|C_p\rangle = e^{-i\hat{S}(t)}|0_p\rangle\ . \tag{I 2.7}$$

Primenom Vejlovog identiteta /44/ lako je pokazati da za koherentna fononska stanja važe sledeće relacije:

$$\begin{aligned}&\langle C_p|u_n|C_p\rangle=\beta_n\ ,\quad \langle C_p|p_n|C_p\rangle=\pi_n\ ,\\&\langle C_p|\dot{u}_n|C_p\rangle=\dot{\beta}_n\ ,\quad \langle C_p|\dot{p}_n|C_p\rangle=\dot{\pi}_n\ .\end{aligned} \tag{I 2.8}$$

Poslednja dva stava dobijena su na osnovu pravila da je srednja vrednost izvoda po vremenu jednaka izvodu srednje vrednosti po vremenu.Pošto je $\langle D(t)|D(t)\rangle=1$,za normalne eksitonske amplitude $A_n(t)$ važi uslov normiranja:

$$\sum_n|A_n(t)|^2=1 \tag{I 2.9}$$

U analizi sistema Davidov koristi Hamiltonov formalizam,a to znači da evoluciju amplitude u vremenu opisuje jednačinom:

ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ ДЕПАРТМАН ЗА ФИЗИКУ БИБЛИОТЕКА НОВИ САД

$$i\hbar\, \dot{A}_n(t) = \frac{\partial}{\partial \overset{*}{A}_n} \langle D(t) | H | D(t) \rangle \tag{I 2.10}$$

S obzirom na (I 2.1) - (I 2.5) lako zaključujemo da je:

$$\mathcal{H} = \sum_n \Big\{ \Big[H_{oe} + H_{op} + C + \Delta - J_D(\beta_{n+1} - \beta_{n-1}) \Big] \overset{*}{A}_n A_n - \\ - R \overset{*}{A}_n (A_{n+1} + A_{n-1}) + J_R \Big[(\beta_{n+1} - \beta_n) \overset{*}{A}_n A_{n+1} + \\ + (\beta_n - \beta_{n-1}) \overset{*}{A}_n A_{n-1} \Big] \Big\} \equiv \langle D(t) | H | D(t) \rangle , \tag{I 2.11}$$

gde je:

$$C = \sum_n \Big[\frac{\pi_n^2}{2M} + \frac{Q}{2} (\beta_n - \beta_{n-1})^2 \Big] , \tag{I 2.12}$$

i

$$H_{op} = \frac{1}{2} \sum_K \hbar \omega_K , \quad \omega_K = v_o |K| , \quad v_o = \frac{a^2 Q}{M} , \tag{I 2.13}$$

energija osnovnog stanja fononskog podsistema.

Treba naglasiti da je ovaj prilaz u suštini varijacionog karaktera, jer jednačina (I 2.10) predstavlja traženje minimuma funkcionala $\langle D | H | D \rangle$. Pošto postoji dopunski uslov održanja norme (I 2.9) bilo bi opštije da se analizira jednačina $i\hbar \frac{\partial A_n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \overset{*}{A}_n} \Big[\langle D | H | D \rangle - \lambda \sum_n |A_n|^2 \Big]$, gde je λ neodredjeni Lagranžev množitelj. U okviru Davidovljevog prilaza ne postoji način da se konzistentno odredi neodredjeni množitelj λ, pa ga on ad hoc odredjuje sa $\lambda = 0$.

U prilazu Davidova neophodno je da se koriste jednačine kretanja za operatore u i p koje glase:

$$\dot{u}_f = \frac{p_f}{M} , \tag{I 2.14}$$

$$\dot{p}_f = \Big[Q(u_{f+1} + u_{f-1} - 2u_f) + J_R(B^+_{f+1}B_f - B^+_{f-1}B_f + B^+_f B_{f+1} - B^+_f B_{f-1}) - J_D(B^+_{f+1}B_{f+1} - B^+_{f-1}B_{f-1})\Big] . \tag{I 2.15}$$

Ove relacije se usrednjavaju po stanjima $|D\rangle$ i dobijaju se odgovarajuće jednačine za koherentne pomeraje i koherentne impulse:

$$\dot{\beta}_f = \frac{\pi_f}{M} \tag{I 2.16}$$

$$\dot{\pi}_f = Q(\beta_{f+1} + \beta_{f-1} - 2\beta_f) - J_D(\overset{*}{A}_{f+1}A_{f+1} - \overset{*}{A}_{f-1}A_{f-1}) + J_R(\overset{*}{A}_{f+1}A_f - \overset{*}{A}_{f-1}A_f + \overset{*}{A}_f A_{f+1} - \overset{*}{A}_f A_{f-1}) . \tag{I 2.17}$$

Kombinovanjem ovih dveju jednačina dobija se:

$$\ddot{\beta}_f = \frac{Q}{M}(\beta_{f+1} + \beta_{f-1} - 2\beta_f) + \frac{J_R}{M}(\overset{*}{A}_{f+1}A_f - \overset{*}{A}_{f-1}A_f + \overset{*}{A}_f A_{f+1} - \overset{*}{A}_f A_{f-1}) - \frac{J_D}{M}(\overset{*}{A}_{f+1}A_{f+1} - \overset{*}{A}_{f-1}A_{f-1}) . \tag{I 2.18}$$

Ako se izvrši prelaz na kontinuum:

$$A_n(t) \to A(x,t) , \quad \dot{A}_n(t) \to \frac{\partial A}{\partial t} , \quad \beta_n(t) \to \beta(x,t) , \quad \dot{\beta}_n(t) \to \frac{\partial \beta}{\partial t}$$

i koristi šema razvoja:

$$\phi_{n\pm 1}(t) \to \phi \pm a \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} , \qquad \phi = A, \beta . \tag{I 2.19}$$

onda se funkcional $\langle D|H|D\rangle$ može napisati u obliku:

$$\langle D(t)|H|D(t)\rangle \equiv \mathcal{H} = \frac{1}{a}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \left\{\left[H_{oe} + H_{op} + C + \Delta - 2R + \right.\right. \tag{I 2.20}$$

$$\left.\left. + 2\chi \frac{\partial \beta(x,t)}{\partial x}\right] \overset{*}{A}(x,t) A(x,t) - a^2 R \overset{*}{A}(x,t) \frac{\partial^2 A(x,t)}{\partial x^2}\right\},$$

gde je:

$$\chi = a\,(J_R - J_D)\,, \tag{I 2.21}$$

i

$$C(t) = \frac{1}{a}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\frac{M}{2}\left(\frac{\partial \beta(x,t)}{\partial t}\right)^2 + a^2 \frac{Q}{2}\left(\frac{\partial \beta(x,t)}{\partial x}\right)^2\right], \tag{I 2.22}$$

Jednačina (I 2.10) se u kontinuumu može napisati kao $i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial A^*}$,što se svodi na:

$$i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} = \left(E_g + C + \Delta - 2R + 2\chi \frac{\partial \beta}{\partial x}\right) A - a^2 R \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}\,, \tag{I 2.23}$$

gde je:

$$E_g = H_{oe} + H_{op}\,, \tag{I 2.24}$$

energija osnovnog stanja sistema.

Napisana u kontinualnoj aproksimaciji jednačina (I 2.18) ima oblik:

$$\frac{\partial^2 \beta(x,t)}{\partial t^2} - a^2 \frac{Q}{M} \frac{\partial^2 \beta(x,t)}{\partial x^2} = \frac{2\chi}{M} \frac{\partial}{\partial x}\left[\overset{*}{A}(x,t) A(x,t)\right]. \tag{I 2.25}$$

Dalje se u teoriji Davidova uvodi funkcija :

$$\rho = \frac{\partial \beta}{\partial x} = \rho(\zeta) \;, \quad \zeta = x - v_k t \;. \tag{I 2.26}$$

Ako se uzme u obzir da je $\frac{\partial}{\partial t} = -v_k \frac{d}{d\zeta}$ i $\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \zeta}$ i jednačina (I 2.25) diferencira po x ,dobija se:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x - v_k t) = -\frac{2\chi}{M(v_0^2 - v_k^2)} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\overset{*}{A}(x,t) A(x,t)\right] , \tag{I 2.27}$$

$$v_0^2 = \frac{a^2 Q}{M}$$

odakle je (uzimamo da su integracione konstante ravne nuli):

$$\rho(x - v_k t) = \frac{\partial \beta}{\partial x} = -\frac{2\chi}{M(v_0^2 - v_k^2)} \overset{*}{A}(x,t) A(x,t) . \tag{I 2.28}$$

Zamenom (I 2.28) u (I 2.23), za normalne eksitonske amplitude A dobijamo nelinearnu Šredingerovu jednačinu:

$$i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} = (E_g + C + \Delta - 2R)A - a^2 R \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} - \frac{4\chi^2}{M(v_0^2 - v_k^2)} |A|^2 A . \tag{I 2.29}$$

Rešenje jednačine (I 2.29) tražimo u obliku:

$$A(x,t) = f(\zeta) e^{ikx - i\omega t} , \quad \zeta = x - v_k t , \quad \overset{*}{f} = f , \tag{I 2.30}$$

gde je:

$$\vartheta_{\kappa} = \frac{2a^2R}{\hbar}\kappa \ , \tag{I 2.31}$$

grupna brzina eksitona.Na osnovu ovoga jednačina (I 2.29) postaje:

$$\frac{d^2f}{d\xi^2} = \Theta(\kappa,E)f - 2\Omega(\kappa)f^3 , \tag{I 2.32}$$

gde je:

$$\Theta = \frac{C + E_{exc} - E}{a^2R} , \quad E_{exc} = \Delta - 2R + Ra^2\kappa^2 , \quad E = \hbar\omega - E_g , \tag{I 2.33}$$

i

$$\Omega(\kappa) = \frac{2\chi^2}{a^2RM(\vartheta_0^2 - \vartheta_\kappa^2)} > 0 \quad , \quad \vartheta_\kappa < \vartheta_0 \ . \tag{I 2.34}$$

Uslov normiranja (I 2.9) zapisan u kontinualnoj aproksimaciji glasi:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx|A(x,t)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi f^2(\xi) = a \tag{I 2.35}$$

Ovde je neophodno naći takvo rešenje jednačine (I 2.32) koje se može normirati uslovom (I 2.35). Takvo rešenje postoji samo ako je grupna brzina eksitona ϑ_κ manja od brzine zvuka ϑ_0 ,naravno pri pozitivnoj efektivnoj masi eksitona ($R>0$).Lako je pokazati da je jedino rešenje (I 2.32) koje se može normirati uslovom (I 2.35) oblika:

$$f(\xi) = \sqrt{\frac{\Theta}{\Omega}}\,\frac{1}{ch\,\xi\sqrt{\Theta}} \ . \tag{I 2.36}$$

Zamenom (I 2.36) u (I 2.35) dobijamo:

$$\left(E_{exc}+C-E\right)^{1/2}=\frac{\varkappa^{2}}{R^{1/2}Mv_{0}^{2}(1-\nu_{\kappa}^{2})}, \qquad \text{(I 2.37)}$$

gde je:

$$\nu_{\kappa}^{2}=\frac{v_{\kappa}^{2}}{v_{0}^{2}}=\frac{4a^{2}R^{2}M}{\hbar^{2}\Theta}\,\kappa^{2}\,. \qquad \text{(I 2.38)}$$

Ako (I 2.36) zamenimo u izrazu (I 2.12), vodeći računa o relaciji (I 2.28) dobijamo:

$$C=\frac{2}{3}\,\frac{R^{1/2}Mv_{0}^{2}(1+\nu_{\kappa}^{2})}{\varkappa^{2}}\left(E_{exc}+C-E\right)^{3/2}. \qquad \text{(I 2.39)}$$

Kombinujući jednačine (I 2.37) i (I 2.39) nalazimo:

$$C=\frac{2}{3}\,\frac{1+\nu_{\kappa}^{2}}{1-\nu_{\kappa}^{2}}\,\frac{\varkappa^{4}}{RM^{2}v_{0}^{4}(1-\nu_{\kappa}^{2})^{2}}\,. \qquad \text{(I 2.40)}$$

Zamenjujući nadjenu vrednost za C u (I 2.37) nalazimo energiju solitona:

$$E_{s}(\kappa)=E_{exc}(\kappa)-\frac{\varkappa^{4}}{RQ^{2}a^{4}(1-\nu_{\kappa}^{2})^{2}}\left(1-\frac{2}{3}\,\frac{1+\nu_{\kappa}^{2}}{1-\nu_{\kappa}^{2}}\right), \qquad \text{(I 2.41)}$$

gde je:

$$E_{exc}(\kappa)=\Delta-2R+Ra^{2}\kappa^{2}\,, \qquad \text{(I 2.42)}$$

energija eksitona.

Normirana amplituda talasnog paketa data je sa:

$$A(x,t)=\frac{a\Omega^{1/2}}{2}\;\frac{e^{ikx-i\frac{E_g+E_s(k)}{\hbar}t}}{ch\,\frac{a\Omega}{2}\,\gamma}\;. \tag{I 2.43}$$

Ovim bi opis Davidovljeve teorije solitona bio završen. Mi ćemo napraviti poredjenje izmedju eksitona i solitona. U tom cilju ćemo formulu (I 2.42) napisati u obliku:

$$E_{exc}(k)=E_{exc}^{int}+\frac{1}{2}m_{exc}v_k^2\;, \tag{I 2.44}$$

gde je :

$$E_{exc}^{int}=\Delta-2R\;, \tag{I 2.45}$$

energija pobudjenja eksitona,

$$m_{exc}=\frac{\hbar^2}{2Ra^2}\;, \tag{I 2.46}$$

efektivna masa eksitona, i

$$v_k=\frac{2a^2R}{\hbar}\,k\;, \tag{I 2.47}$$

grupna brzina.

Ako u formuli (I 2.41) uzmemo približno

$$(1-\nu_k^2)^{-2}\approx 1+2\nu_k^2\quad,\qquad (1-\nu_k^2)^{-1}\approx 1+\nu_k^2\;,$$

onda je možemo napisati u obliku:

$$E_S(K) = E_S^{int} + \frac{1}{2} m_S \upsilon_K^2 , \qquad (I\ 2.48)$$

gde je:

$$E_S^{int} = E_{exc}^{int} - \frac{\chi^4}{3RQ^2a^4} , \qquad (I\ 2.49)$$

energija pobudjivanja solitona, i

$$m_S = m_{exc} + \frac{4\chi^4}{3RQ^2a^4\upsilon_0^2} , \qquad (I\ 2.50)$$

efektivna masa solitona.

Razlike izmedju eksitona i solitona su sledeće:

a) Eksitonska stanja su ravni talasi dok su solitoni talasni paketi sa amplitudom datom izrazom (I 2.43).Na osnovu ove činjenice smatra se da,za razliku od eksitona, soliton kao talasni paket stabilne forme može da prenosi informaciju,energiju,impuls itd.

b) Energija pobudjivanja solitona (prag energije) je manja od odgovarajuće energije za eksiton pa se zaključuje da se soliton može obrazovati dejstvom kvanta niže energije nego što su kvanti potrebni za formiranje eksitona.

c) Soliton ima veću efektivnu masu nego eksiton i,pošto se pretpostavlja da se kreću istom brzinom υ_K,veću kinetičku energiju.Po Davidovu ovo znači da je soliton sposoban da preda više informacije nego eksiton.

U radu /45/ iznesene su sumnje u korektnost Hamiltonovog formalizma koji u teoriji solitona koristi Davidov. Predloženo je da se u ovoj teoriji koristi Lagranžev formalizam u kome bi se jednačine kretanja formirale variranjem Lagranževe funkcije sistema. Za Lagranževu funkciju predlaže se definicija:

$$\mathcal{L} = \langle D(t) | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) | D(t) \rangle \, . \tag{I 2.51}$$

Iz navedene definicije odmah se vidi da funkcije $| D(t) \rangle$ ne zadovoljavaju Šredingerovu jednačinu, jer bi u protivnom bilo $\mathcal{L} = 0$.

Ovde ćemo razmatrati šta daje teorija solitona zasnovana na Lagranževom formalizmu, gde je ekvivalent jednačine (I 2.10) dat sa:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \overset{*}{A}(x,t)} = 0 \, . \tag{I 2.52}$$

U ovom prilazu, pošto smo odabrali iste funkcije kao i Davidov, jednačina (I 2.18) ostaje nepromenjena kao i uslov normiranja (I 2.9).

Da bismo eksplicitno naglasili Lagranževu funkciju i jednačinu (I 2.52) neophodno je odrediti srednju vrednost:

$$\langle D(t) | \, i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \, | D(t) \rangle \, . \tag{I 2.53}$$

Ako u izrazu (I 2.53) zamenimo eksplicitni oblik funkcije $|D(t)\rangle$, možemo pisati (uzeto je :

$$\frac{\partial}{\partial t} e^{-i\hat{S}} = -\frac{i}{2} \left(\dot{\hat{S}} e^{-i\hat{S}} + e^{-i\hat{S}} \dot{\hat{S}} \right) \;) :$$

$$\langle D(t)|\, i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |D(t)\rangle = i\hbar \sum_n \overset{*}{A}_n \dot{A}_n + \qquad \text{(I 2.54)}$$

$$+ \frac{\hbar}{2} \sum_{nm} \overset{*}{A}_n A_m \langle O_e| B_m \langle O_p| e^{i\hat{S}} \dot{\hat{S}} e^{-i\hat{S}} B_n^+ |O_p\rangle |O_e\rangle .$$

Primenom formule (I 2.26) i (I 2.17) kao i korišćenjem činjenice da je:

$$\dot{\hat{S}} = \frac{1}{\hbar} \sum_n \left(\dot{\beta}_n p_n + \beta_n \dot{p}_n - \dot{\pi}_n u_n - \pi_n \dot{u}_n \right) , \qquad \text{(I 2.55)}$$

dobijamo:

$$\langle D(t)|\, i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |D(t)\rangle = i\hbar \sum_n \overset{*}{A}_n \dot{A}_n -$$

$$-\frac{1}{2} \sum_n \beta_n \Big[J_R \big(\overset{*}{A}_{n+1} A_n - \overset{*}{A}_{n-1} A_n + \overset{*}{A}_n A_{n+1} - \overset{*}{A}_n A_{n-1} \big) - \qquad \text{(I 2.56)}$$

$$- J_D \big(\overset{*}{A}_{n+1} A_{n+1} - \overset{*}{A}_{n-1} A_{n-1} \big) \Big] .$$

Ako dobijeni rezultat uvrstimo u izraz za $\mathcal{L}$ i iskoristimo kontinualnu aproksimaciju možemo pisati:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Big\{ i\hbar \overset{*}{A}(x,t) \frac{\partial \overset{*}{A}(x,t)}{\partial t} - a^2 R \overset{*}{A}(x,t) \frac{\partial^2 A(x,t)}{\partial x^2} -$$

$$- \Big[H_{oe} + H_{op} + C + \Delta - 2R + \chi \frac{\partial \beta}{\partial x} \Big] \overset{*}{A}(x,t) A(x,t) \Big\} , \qquad \text{(I 2.57)}$$

odakle, na osnovu (I 2.52) sledi jednačina za amplitude A, oblika:

$$i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} = \Big(E_g + C^{(\varkappa)} + \Delta - 2R + \chi \frac{\partial \beta}{\partial x} \Big) A - a^2 R \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} . \qquad \text{(I 2.58)}$$

Dobijena jednačina predstavlja ekvivalent jednačine (I 2.23) dobijene Hamiltonovim formalizmom.Dalja procedura računa je potpuno identična sa prethodnom pa je nećemo ponavljati.Navešćemo samo završne rezultate.

Energija solitona u Lagranževom formalizmu data je sa:

$$E_s^{(\mathcal{L})}(k) = E_{exc}(k) - \frac{\chi^4}{4RQ^2a^2(1-\nu_k^2)^2}\left(1 - \frac{4}{3}\frac{1+\nu_k^2}{1-\nu_k^2}\right) . \qquad \text{(I 2.59)}$$

Ako iskoristimo aproksimaciju $(1-\nu_k^2)^{-n} \approx 1 - n\nu_k^2$, onda se poslednja formula svodi na:

$$E_s^{(\mathcal{L})}(k) = E_s^{(\mathcal{L})int} + \frac{1}{2} m_s^{(\mathcal{L})} v_k^2 , \qquad \text{(I 2.60)}$$

gde je:

$$E_s^{(\mathcal{L})int} = E_{exc}^{int} + \frac{\chi^4}{12RQ^2a^4} , \qquad \text{(I 2.61)}$$

energija pobudjivanja solitona, i

$$m_s^{(\mathcal{L})} = m_{exc} + \frac{5\chi^4}{3RQ^2a^4v_0^2} , \qquad \text{(I 2.62)}$$

efektivna masa solitona.

Ako (I 2.61) uporedimo sa (I 2.49) dolazimo do zaključka da je energija potrebna za pobudjivanje solitona veća od odgovarajuće energije za eksiton. Ovaj rezultat je dijametralno suprotan zaključku koji smo izveli u okvirima Hamiltonovog formalizma *). Poredjenjem formule (I 2.50) i (I 2.62) vidimo da je efektivna masa solitona prema Lagranževom formalizmu nešto veća od efektivne mase koju daje Hamiltonov formalizam.

Na kraju pošto je:

$$\Omega^{(\mathcal{L})}(k) = \frac{1}{2}\,\Omega(k) \qquad \text{(I 2.63)}$$

može se na osnovu formule (I 2.43) zaključiti da je amplituda A prema Lagranževom formalizmu $\sqrt{2}$ puta manja nego solitonska amplituda dobijena Hamiltonovim formalizmom.

Rezimirajući rezultate koje daje Lagranžev formalizam u odnosu na rezultate dobijene Hamiltonovim formalizmom, možemo zaključiti da primena Lagranževog formalizma vodi na talasne pakete sa manjom amplitudom, većom efektivnom masom i većim pragom energije potrebnim za pobudjivanje.

---

*) Treba naglasiti da Lagranžev i Hamiltonov formalizam mogu dati identične rezultate ako se u (I 2.54) ne koristi egzaktna formula (I 2.17) za $\dot{\pi}_f$ već približna formula, dobijena ne preko totalnog hamiltonijana već samo preko hamiltonijana fononskog podsistema. Tada je $\dot{\pi}_f = Q(\beta_{f+1}+\beta_{f-1}-2\beta_f)$ i jednačine dobijene Lagranževim formalizmom svode se na jednačine dobijene Hamiltonovim formalizmom.

I 3. KVANTNA TEORIJA SOLITONA

U ovom delu ćemo analizirati problem solitona koristeći Hajzenbergove jednačine kretanja za aktuelne operatore. Osnovne jednačine biće formirane u operatorskom obliku, a prelaz na klasične amplitude biće izvršen tek onda kada se potpuno iscrpi kinematika eksitonskih i fononskih operatora.

Hamiltonijan jednodimenzionog molekulskog lanca ćemo kao i ranije uzeti u obliku:

$$H = H_e + H_p + H_{ep} \quad , \tag{I 3.1}$$

gde je:

$$H_e = H_{oe} + \Delta \sum_n B_n^+ B_n - R \sum_n B_n^+ (B_{n+1} + B_{n-1}) \; ,$$

(I 3.2)

$$H_{oe} = N\mathcal{E}_o - \frac{1}{2}\sum_{n,m} V_{nm}(0000) , \quad \Delta = \mathcal{E}_f - \mathcal{E}_o + 2D ,$$

hamiltonijan eksitonskog podsistema,

$$H_p = \frac{1}{2M}\sum_n p_n^2 + \frac{Q}{2}\sum_n (u_n - u_{n-1})^2 \; , \tag{I 3.3}$$

hamiltonijan fononskog podsistema,i

$$H_{ep} = J_R \sum_n (B_n^+ B_{n+1} + B_{n-1}^+ B_n)(u_n - u_{n-1}) -$$

$$- J_D \sum_n B_n^+ B_n (u_{n+1} - u_{n-1}) ,$$

$$J_R = N^{-1} \sum_K K R_K \sin aK \quad , \quad J_D = N^{-1} \sum_K K D_K \sin aK , \qquad \text{(I 3.4)}$$

hamiltonijan eksiton-fonon interakcije uzet u linearnoj aproksimaciji u odnosu na molekulske pomeraje.

Hamiltonijan (I 3.1) uzet je u aproksimaciji najbližih suseda.Upotrebljene oznake su kao i ranije: $\mathcal{E}_f$ i $\mathcal{E}_o$ su energije pobudjenog molekula i energija molekula u osnovnom stanju,respektivno, V , D i R su matrični elementi dipol-dipolne interakcije,pri čemu je $R>0$ (eksitoni imaju pozitivnu efektivnu masu), N je broj molekula u kristalu, M je masa molekula,a p njen impuls, Q je konstanta elastične sile i a je konstanta rešetke.Boze-operatori B_n^+ i B_n su operatori kreacije i anihilacije solitona na čvoru n ,dok u i p zadovoljavaju relaciju $[u_n, p_m] = i\hbar \delta_{nm}$.

Jednačine kretanja za operatore B , u i p su sledeće:

$$i\hbar \dot{B}_f = \Delta B_f - R(B_{f+1} + B_{f-1}) +$$

$$+ J_R [B_{f+1}(u_{f+1} - u_f) + B_{f-1}(u_f - u_{f-1})] -$$

$$- J_D B_f (u_{f+1} - u_{f-1}) , \qquad \text{(I 3.5)}$$

$$\dot{u}_f = M^{-1} p_f , \qquad \text{(I 3.6)}$$

$$\dot{p}_f = Q(u_{f+1} + u_{f-1} - 2u_f) +$$
$$+ J_R(B^+_{f+1}B_f - B^+_{f-1}B_f + B^+_f B_{f+1} - B^+_f B_{f-1}) -$$
$$- J_D(B^+_{f+1}B_{f+1} - B^+_{f-1}B_{f-1}). \qquad \text{(I 3.7)}$$

Kombinujući (I 3.6) i (I 3.7) dolazimo do jednačine:

$$M\ddot{u}_f = Q(u_{f+1} + u_{f-1} - 2u_f) +$$
$$+ J_R(B^+_{f+1}B_f - B^+_{f-1}B_f + B^+_f B_{f+1} - B^+_f B_{f-1}) -$$
$$- J_D(B^+_{f+1}B_{f+1} - B^+_{f-1}B_{f-1}). \qquad \text{(I 3.8)}$$

Sledeći korak, koji je bitan u ovoj analizi je simetrizacija interakcionih članova u (I 3.5). Drugim rečima poslednja dva člana u (I 3.5) ćemo napisati u simetrizovanoj formi:

$$J_R\left[B_{f+1}(u_{f+1} - u_f) + B_{f+1}(u_f - u_{f-1})\right] =$$
$$= \frac{1}{2}J_R\left[B_{f+1}(u_{f+1} - u_f) + B_{f-1}(u_f - u_{f-1})\right] +$$
$$+ \frac{1}{2}J_R\left[(u_{f+1} - u_f)B_{f+1} + (u_f - u_{f-1})B_{f-1}\right], \qquad \text{(I 3.9)}$$

$$J_D B_f(u_{f+1} - u_{f-1}) = \frac{1}{2}J_D B_f(u_{f+1} - u_{f-1}) +$$
$$+ \frac{1}{2}J_D(u_{f+1} - u_{f-1})B_f \quad .$$

Neophodnost ove simetrizacije ćemo kasnije prodiskutovati.

Ako u simetrizovanoj jednačini (I 3.5) i jednačini (I 3.8) predjemo na kontinuum po šemi:

$$\phi_f(t) \to \phi(x,t), \quad \phi_{f\pm 1} \approx \phi(x,t) \pm a\frac{\partial \phi(x,t)}{\partial x} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 \phi(x,t)}{\partial x^2}, \tag{I 3.10}$$

dolazimo do sledećeg sistema diferencijalnih jednačina:

$$i\hbar\frac{\partial B}{\partial t} = (\Delta - 2R)B - a^2 R\frac{\partial^2 B}{\partial x^2} + \chi\left(B\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial x}B\right), \tag{I 3.11}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - v_0^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{2}{M}\chi\frac{\partial}{\partial x}(B^+B), \tag{I 3.12}$$

U ovim jednačinama je:

$$\chi = a(J_R - J_D), \tag{I 3.13}$$

interakciona energija, i

$$v_0 = a\sqrt{\frac{Q}{M}}, \tag{I 3.14}$$

brzina longitudinalnih zvučnih talasa.

U jednačini (I 3.12) uzimamo:

$$u(x,t) \to u(x - vt) \tag{I 3.15}$$

što nam odmah daje rezultat:

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = -2\chi M^{-1}(v_0^2 - v^2)^{-1}\frac{d}{dx}(B^+B) \tag{I 3.16}$$

Kao i ranije dobijenu jednačinu integralimo po x sa integracionom konstantom ravnom nuli i dobijamo:

$$\frac{du}{dx} = - \frac{2\chi}{M(\upsilon_0^2 - \upsilon^2)} B^+ B = \frac{\partial u}{\partial x} . \tag{I 3.17}$$

Ako (I 3.17) uvrstimo u (I 3.11) i proizvode operatora B svedemo na normalne proizvode dobijamo operatorsku nelinearnu Šredingerovu jednačinu:

$$i\hbar \frac{\partial B}{\partial t} - \left[\Delta - 2R - \frac{2\chi^2}{M(\upsilon_0^2 - \upsilon^2)} \right] B + a^2 R \frac{\partial^2 B}{\partial x^2} + \\ + \frac{4\chi^2}{M(\upsilon_0^2 - \upsilon^2)} B^+ B B = 0 . \tag{I 3.18}$$

Na ovom mestu postaje jasno zbog čega je simetrizacija (I 3.9) bila neophodna.U nesimetrizovanoj jednačini (I 3.5) za red operatora uB korekcija $-2\chi^2 M^{-1}(\upsilon_0^2-\upsilon^2)^{-1}$ isčezava,dok za poredak operatora Bu postaje duplo veća. U prvom slučaju dobili bismo rezultat koji daje kvaziklasična teorija.Prema ovome bi izašlo da eksiton-fonon interakcija ne popravlja harmonijsku eksitonsku energiju,što je u suprotnosti sa rezultatima radova /46,47/ u kojima je primenom Frelihove transformacije /48,49/ pokazano da usled eksiton-fonon interakcije harmonijski eksitonski spektar trpi korekcije.Druga mogućnost,koja vodi do udvajanja korekcije takodje nije u skladu sa rezultatima pomenutih radova.Ovaj slučaj biće detaljnije diskutovan u sledećem paragrafu.

Analizirajući jednačinu (I 3.18) dolazimo do jednog bitno novog zaključka u odnosu na kvaziklasični prilaz.Ako operator koji stoji na levoj strani jednačine (I 3.15) primenimo na kvaziklasičnu funkciju

$$|D\rangle = e^{-\hat{S}} \sum_{n} A_n(t) B_n^+ |0_e\rangle$$

poslednji član u (I 3.18) isčezava a sa njim i nelinearnost koja dovodi do stvaranja talasnih paketa.Treba naglasiti da poslednji član iz (I 3.18) ne bi isčezao ako bismo koristili dvočestična normalna eksitonska stanja,ali njih nesmemo koristiti s obzirom na formu hamiltonijana (I 3.2).Korišćenje dvočestičnih normalnih eksitonskih stanja zahtevalo bi da se hamiltonijan (I 3.2) dopuni članovima četvrtog reda po Boze-operatorima.Kao što se vidi u striktno kvantnom prilazu obrazovanje solitona je nemoguće na normalnim eksitonskim stanjima.

Pošto se solitoni nemogu obrazovati u prostoru normalnih jednočestičnih eksitonskih stanja /50/, ostaje da ispitamo šta se dogadja u prostoru koherentnih eksitonskih stanja.Ideju o koherentnim bozonskim stanjima kao bazisu u kome se nelinearni efekti ne gube prvi je dao Bogoljubov u analizi dinamike superfluidne tečnosti.Procedura formiranja jednačine za superfluidno kretanje tečnosti kvazičestica izložena je u radovima /41,51/.U svim pomenutim radovima nije se navodio konkretan oblik koherentnih stanja,pa ćemo ih stoga ovde definisati i to na sledeći način:

$$|C_e\rangle = e^{-\hat{W}} |0_e\rangle ,$$

$$W = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\alpha^*(x,t) B(x,t) - \alpha(x,t) B^+(x,t) \right] , \qquad \text{(I 3.19)}$$

$$\langle C_e | B(x,t) | C_e \rangle = \alpha(x,t) \;, \quad \langle C_e | B^+(x,t) | C_e \rangle = \overset{*}{\alpha}(x,t) \;,$$

$$\langle C_e | \frac{\partial B(x,t)}{\partial t} | C_e \rangle = \frac{\partial \alpha(x,t)}{\partial t} \;, \quad \langle C_e | \frac{\partial^2 B(x,t)}{\partial t^2} | C_e \rangle = \frac{\partial^2 \alpha(x,t)}{\partial t^2} \;.$$

U ovim formulama $|0_e\rangle$ je eksitonski vakum.Takodje treba istaći da je prilikom dobijanja formule (I 3.19) korišćeno pravilo o tome da je srednja vrednost izvoda jednaka izvodu srednje vrednosti.Komutacione relacije za Boze-operatore u kontinuumu,koje su takodje korišćene za dobijanje relacija (I 3.19) ovde ćemo detaljnije diskutovati.Prilikom prelaska u kontinuum Kronekerov simbol $\delta_{n,m} \to a\delta(x-y)$ .Zbog toga bozonski komutator $[B_n, B_m^+] = \delta_{n,m}$ pri prelasku na kontinuum postaje $[B(x), B^+(y)] = a\,\delta(x-y)$ .Da bi se u kontinuumu održala relacija $[B_n^+, B_n] = 1$ neophodna je definicija $\delta(0) = \frac{1}{a}$. Ako uzmemo u obzir da je:

$$\langle C_e | B^+ B B | C_e \rangle = \langle C_e | B^+ | C_e \rangle \langle C_e | B | C_e \rangle \langle C_e | B | C_e \rangle = |\alpha|^2 \alpha \,, \tag{I 3.20}$$

lako zaključujemo da operatorska jednačina (I 3.18) usrednjena po koherentnim eksitonskim stanjima postaje:

$$i\hbar \frac{\partial \alpha}{\partial t} = \left[\Delta - 2R - \frac{2\chi^2}{M(v_0^2 - v^2)}\right]\alpha - a^2 R \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} - \frac{4\chi^2}{M(v_0^2 - v^2)} |\alpha|^2 \alpha \,. \tag{I 3.21}$$

Kao što se vidi solitonski problem se sveo na rešavanje nelinearne Šredingerove jednačine po koherentnim amplitudama α za razliku od odgovarajuće jednačine u kvaziklasičnom prilazu u kojoj figurišu normalne eksitonske amplitude A. Takodje se vidi da je koeficijent uz linearni član po α dobio kvantnu korekciju $-2\chi^2 M^{-1}(v_0^2-v^2)^{-1}$. Sama procedura rešavanja jednačine (I 3.21) ostaje ista kao i ranije, tj. rešenje tražimo u obliku:

$$\alpha(x,t) = f(x-vt)\, e^{i\kappa x - i\omega t}, \qquad \overset{*}{f} = f, \quad v = \frac{2a^2R}{\hbar}\kappa, \tag{I 3.22}$$

i dolazimo do jednačine:

$$\frac{d^2f}{d\xi^2} = \Theta(\kappa,E)f - 2\Omega(\kappa)f^3, \tag{I 3.23}$$

gde je:

$$\Theta(\kappa,E) = \frac{\Delta - 2R - E}{Ra^2} - \kappa^2 - \Omega(\kappa), \qquad E = \hbar\omega, \tag{I 3.24}$$

i

$$\Omega(\kappa) = \frac{1}{Ra^2}\,\frac{2\chi^2}{M(v_0^2-v^2)}, \qquad \xi = x - vt. \tag{I 3.25}$$

Pre rešavanja jednačine (I 3.23) analiziraćemo uslov normiranja za koherentne amplitude α .Pošto je eksitonski hamiltonijan (I 3.2) uzet u Hajtler-Londonovoj aproksimaciji, to znači /42/ da u sistemu egzistira samo jedno optičko pobudjenje.Otuda možemo pisati:

$$\sum_n B_n^+ B_n = \hat{1} , \tag{I 3.26}$$

gde je $\hat{1}$ jedinični operator u prostoru eksitonskih stanja. Usrednjavajući relaciju (I 3.26) po koherentnim eksitonskim stanjima $|C_e\rangle$ dolazimo do uslova normiranja koherentnih amplituda:

$$\sum_n |\alpha_n(t)|^2 = 1 , \tag{I 3.27}$$

ili u kontinualnoj aproksimaciji:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\alpha(x,t)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, f^2(\xi) = a . \tag{I 3.28}$$

Lako se može konstatovati da je jedino rešenje jednačine (I 3.23) koje se može normirati uslovom (I 3.28) oblika:

$$f(\xi) = \sqrt{\frac{\Theta}{\Omega}}\, \frac{1}{ch\, \xi\sqrt{\Theta}} \tag{I 3.29}$$

Zamenom (I 3.29) u (I 3.28) dobijamo solitonsku energiju u obliku:

$$E_S(\kappa) = \Delta - 2R + Ra^2\kappa^2 - \frac{[1 + F(\kappa)]\, \chi^4}{RM^2 v_0^4 (1 - \nu_\kappa^2)^2} , \tag{I 3.30}$$

gde je:

$$\nu_\kappa^2 = \left(\frac{v}{v_0}\right)^2 = \frac{4aR^2M}{\hbar^2 Q}\,\kappa^2 \ll 1 \,,$$

$$F(\kappa) = \frac{2R}{\chi^2} M v_0^2 (1-\nu_\kappa^2) \,. \tag{I 3.31}$$

Normalizovane koherentne amplitude date su sledećim izrazom:

$$\alpha(x,t) = \frac{a}{2}\sqrt{\Omega(\kappa)}\,\frac{e^{i\kappa x - i\hbar^{-1}E_S(\kappa)t}}{ch\,\frac{a\,\Omega(\kappa)}{2}(x-vt)} \,. \tag{I 3.32}$$

Sa ciljem da nadjemo koherentne molekulske pomeraje koristićemo koherentna fononska stanja:

$$|C_p\rangle = e^{-i\hat{S}}|0_p\rangle \,,$$

$$\hat{S} = (\hbar a)^{-1}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\left[\beta(x,t)\,p(x,t) - \pi(x,t)\,u(x,t)\right], \tag{I 3.33}$$

$$\langle C_p|u(x,t)|C_p\rangle = \beta(x,t) \;; \quad \langle C_p|p(x,t)|C_p\rangle = \pi(x,t) \,,$$

i jednačinu (I 3.17) usrednjiti po stanjima $|C_p\rangle|C_e\rangle$.
Rezultat usrednjavanja je:

$$\frac{d\beta}{d\xi} = -\frac{\chi^3}{RM^2 v_0^4(1-\nu_\kappa^2)^2}\, ch^{-2}\frac{a\,\Omega(\kappa)}{2}\,\xi \,, \tag{I 3.34}$$

odakle možemo zaključiti da se deformacija rešetke menja sa trećim stepenom interakcione energije χ .

Rezimirajući rezultate ovde izloženog kvantnog prilaza solitonskom problemu možemo zaključiti sledeće:

a) Talasni paketi u molekulskim kristalima mogu da nastanu samo u prostoru koherentnih eksitonskih stanja. U prostoru normalnih eksitonskih jednočestičnih stanja ne mogu se obrazovati talasni paketi i ova činjenica predstavlja bitnu razliku izmedju kvaziklasičnog i kvantnog prilaza.

b) Rezultati solitonske analize bitno zavise od toga u kojoj se fazi proračuna prelazi sa operatora na amplitude. Rezultat kvaziklasične teorije mogao se u okviru ovoga prilaza dobiti ako bismo hamiltonijan (I 3.1) usrednjili po stanjima $|C_p\rangle|C_e\rangle$ ili po stanjima $|D\rangle$ i primenili ranije opisani postupak kvaziklasične teorije. Takodje bismo rezultat kvaziklasične teorije dobili ako bismo jednačine (I 3.11) i (I 3.12) usrednjili po stanjima $|C_p\rangle|C_e\rangle$ ili po stanjima $|D\rangle$. U ovde navedenom prilazu usrednjavanje po koherentnim stanjima je izvršeno u operatorskoj jednačini (I 3.18), a ona je, kao što smo videli, dobijena tek kada je do potpunosti iscrpljena kvantna priroda eksitona i fonona. U ovako dobijenoj jednačini jasno su se mogle uočiti razlike izmedju kvaziklasičnog i kvantnog prilaza, a one su: mogućnost obrazovanja paketa u prostoru normiranih eksitonskih stanja i kvantna korekcija solitonske energije.

I 4. METOD EKVIVALENTNOG HAMILTONIJANA U TEORIJI SOLITONA

U prethodna dva paragrafa smo videli da kvaziklasični prilaz u analizi solitona i kvantni prilaz u ovoj istoj analizi daju bitno različite rezultate.Najbitnija razlika sastoji se u tome što je u kvaziklasičnoj teoriji obrazovanje solitona moguće na stanjima koja predstavljaju proizvod koherentnih fononskih stanja i normalnih eksitonskih stanja.U kvantnom prilazu soliton se može obrazovati samo na stanjima koja predstavljaju proizvod koherentnih fononskih stanja i koherentnih eksitonskih stanja.Takodje smo konstatovali da se energija solitona koju daje kvaziklasični prilaz razlikuje od energije koja se dobija u kvantnom prilazu.Ova razlika nastala je usled simetrizacije produkta $Bu = \frac{1}{2}(Bu + uB)$ koja je izvršena u okvirima kvantnog prilaza.U paragrafu I 3. je naglašeno da bi red operatora uB doveo do klasične energije solitona,dok bi poredak Bu dao dvostruko veću korekciju klasične energije nego što je dobijena putem simetrizacije.Da bismo razrešili dilemu o poredku operatora ovde ćemo analizirati solitonski problem iz jednog drugog ugla.Naime,pokušaćemo da hamiltonijan sistema koji sadrži interagujuće eksitone i fonone separišemo na dva dela od kojih bi jedan sadržao samo eksitonske operatore,a drugi samo fononske operatore. U tom cilju poslužićemo se idejama Freliha /48,49/, koje su u teoriji eksitona više puta bile primenjene u radovima /46,47/.

Eksitonski hamiltonijan "zamrznutog" jednodimenzionog molekulskog kristala napisaćemo u obliku:

$$H_e = \Delta_o \sum_n B_n^+ B_n + \sum_{nm} D_{n-m} B_n^+ B_n - \sum_{nm} R_{n-m} B_n^+ B_m ,$$
(I 4.1)
$$\Delta_o = \mathcal{E}_f - \mathcal{E}_o , \quad D_{n-m} = D_{m-n} , \quad R_{n-m} = R_{m-n} .$$

U ovoj formuli $\mathcal{E}_f$ i $\mathcal{E}_o$ su energije izolovanog molekula u pobudjenom stanju f i osnovnom stanju O ,respektivno,dok su D_{n-m} i R_{n-m} realni matrični elementi operatora dipol-dipolne interakcije.U daljem ćemo pretpostaviti da je $R_{n-m} > 0$ dok znak D_{n-m} može da bude i pozitivan i negativan.

Pri povišenju temperature $n \to n + u_n$, $m \to m + u_m$,pa ćemo koristiti šemu:

$$\Lambda_{n-m} \to \Lambda_{n-m} + (u_n - u_m) = \frac{1}{N} \sum_k \Lambda_k e^{ika(n-m) + ik(u_n - u_m)} \approx$$
$$\approx \Lambda_{n-m} + \frac{i}{N} \sum_k k \Lambda_k (u_n - u_m) e^{ika(n-m)} , \qquad \text{(I 4.2)}$$
$$(\Lambda \equiv D, R) .$$

Ovde je N -ukupan broj molekula u lancu, a -konstanta rešetke, $\Lambda_k = \sum_{n-m} \Lambda_{n-m} e^{-ika(n-m)}$ .Eksitonske operatore ćemo predstaviti kao:

$$B_n = \frac{1}{N}\sum_k B_k e^{ikna}, \tag{I 4.3}$$

dok ćemo za operatore molekulskih pomeraja koristiti izraz:

$$u_n = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}}\, \ell_k (b_k + b^+_{-k}) e^{ikna}, \tag{I 4.4}$$

u kome je M-masa molekula, ℓ_k-polarizacioni vektor fonona, b_k i b_k^+ operatori koji anihiliraju i kreiraju fonone sa talasnim vektorom k i $\omega_k = \vartheta_0 |k|$ frekvencija fonona. Veličina $\vartheta_0 = a\sqrt{\frac{Q}{M}}$ predstavlja brzinu zvučnih talasa, pri čemu je Q - konstanta elastične sile.

Hamiltonijan fononskog sistema dat je izrazom:

$$H_p = \frac{1}{2}\sum_n \left[M\dot{u}_n^2 + Q(u_n - u_{n-1})^2 \right]. \tag{I 4.5}$$

Zamenom (I 4.2) - (I 4.4) u (I 4.1) i (I 4.5) dobijamo hamiltonijan sistema interagujućih eksitona i fonona u obliku:

$$H = H_e + H_p + H_{ep}, \tag{I 4.6}$$

gde je:

$$H_e = \sum_k E_e(k) B_k^+ B_k, \quad E_e(k) = \Delta_0 + D_0 - R_k, \tag{I 4.7}$$

hamiltonijan eksitonskog podsistema,

$$H_p = \sum_{k} E_p(k) b_k^+ b_k \, , \quad E_p(k) = \hbar\omega_k \, , \tag{I 4.8}$$

hamiltonijan fononskog podsistema,i

$$H_{ep} = \sum_{kq} F_{kq} B_k^+ B_{k-q} (b_q + b_{-q}^+) , \quad \overset{*}{F}_{k-q,q} = F_{k,q} \, , \tag{I 4.9}$$

hamiltonijan eksiton-fonon interakcije.Funkcija $F_{k,q}$ koja figuriše u (I 4.9) data je izrazom:

$$F_{k,q} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_q N}} \left(q l_q R_{k-q} - q l_q D_q + k l_q R_k - k l_q R_{k-q} \right) . \tag{I 4.10}$$

Od hamiltonijana (I 4.6) preći ćemo na ekvivalentni hamiltonijan unitarnom transformacijom:

$$H_{eq} = e^{-\hat{S}} H e^{\hat{S}} \approx H - [\hat{S}, H] + \frac{1}{2}[\hat{S}, [\hat{S}, H]] \tag{I 4.11}$$

gde je antiermicki operator $\hat{S}$ dat izrazom:

$$\hat{S} = S_1 - S_1^+ \, ,$$

$$S_1 = \sum_{kq} \frac{F_{k,q}}{E_e(k-q) - E_e(k) + E_p(q)} B_k^+ B_{k-q} b_q \tag{I 4.12}$$

Ako u (I 4.11) odbacimo delove proporcionalne F^3,a takodje i delove koji su proporcionalni $F^2 B^+ B b^+ b$,jer konsenkventno ostajemo u granicama aproksimacije u kojoj je eksiton-fonon interakcija linearna po fononskim operatorima, onda se ekvivalentni hamiltonijan može napisati u obliku:

$$H_{eq} = H_p + H_e - \sum_{kq} \frac{F_{k+q,q}\, F_{k,-q}}{E_e(k+q) - E_e(k) + E_p(q)} B_k^+ B_k -$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{kqp} \left\{ \frac{F_{p,q}\, F_{k,-q}}{E_e(k+q) - E_e(k) + E_p(q)} + \frac{F_{p,q}\, F_{k,-q}}{E_e(p) - E_e(p-q) + E_p(q)} \right\} B_k^+ B_p^+ B_{k+q} B_{p-q}$$

(I 4.13)

Kao što se vidi iz dobijenog izraza energija fononskog podsistema u ukazanoj aproksimaciji je ostala neprimenjena, dok je eksitonski hamiltonijan korigovan trećim i četvrtim članom formule (I 4.13).

Da bismo na ekvivalentni hamiltonijan mogli da primenimo standardne metode solitonske teorije, neophodno je da ga napišemo u konfiguracionom prostoru. Zbog toga ćemo koristiti transformaciju inverznu (I 4.3) tj.:

$$B_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n B_n e^{-ikna} . \qquad \text{(I 4.14)}$$

Invertovani hamiltonijan H_e uzet u aproksimaciji najbližih suseda $R = 2R\cos ak$ i $D_o = 2D$ ima oblik:

$$H_e^{n.n.} = \sum_n (\Delta_o + 2D) B_n^+ B_n - R \sum_n B_n^+ (B_{n+1} + B_{n-1}) ,$$

(I 4.15)

gde R i D predstavljaju interakcije izmedju najbližih suseda.

Prilikom inverzije poslednja dva člana u formuli (I 4.13) koristićemo aproksimaciju:

$$F_{k+q,q} F_{k,-q} = F_{p,q} F_{k,-q} \approx \frac{2\hbar (R-D)^2}{NM\vartheta_0} \frac{q^2}{|q|} \quad . \tag{I 4.16}$$

Treba naglasiti da je izraz (I 4.16) dobijen korišćenjem aproksimacije najbližih suseda i aproksimacije malih talasnih vektora, znači po šemi:

$$\Lambda_{k-q} = 2\Lambda - \Lambda a^2(k^2 + q^2 - 2kq\cos\theta) , \tag{I 4.17}$$

gde $\cos\Theta$ uzima samo dve vrednosti 1 ili -1 ,jer k i q leže u pravcu jednodimenzione strukture. Takodje su prilikom dobijanja ovog izraza odbačeni članovi proporcionalni $k(ak)^2$ zbog toga što je $ak \ll 1$.

Na osnovu (I 4.14) i (I 4.16), kvadratna popravka iz formule (I 4.13) (označićemo je sa H_2) može se u aproksimaciji najbližih suseda napisati kao:

$$H_2 = -\frac{2\hbar (R-D)^2}{M\vartheta_0^2} \sum_n \left[L_{0,0} B_n^+ B_n + L_{0,1} B_n^+ B_{n+1} + L_{0,-1} B_n^+ B_{n-1} \right] , \tag{I 4.18}$$

gde je:

$$L_{0,0} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{N} \sum_q \frac{q^2}{|q|} \frac{1}{E_e(k+q) - E_e(k) + E_p(q)} , \tag{I 4.19}$$

$$L_{0,\pm 1}=\frac{1}{N}\sum_{k}e^{\mp ikq}\frac{1}{N}\sum_{q}\frac{q^2}{|q|}\frac{1}{E_e(k+q)-E_e(k)+E_p(q)}\,,$$

(I 4.20)

dok popravka četvrtog reda (označićemo je sa H_4) u aproksimaciji najbližih suseda ima oblik:

$$\begin{aligned}H_4=-\frac{\hbar(R-D)^2}{M\vartheta_0^2}\sum_{n}\Big[&T_{0,0,0,0}B_n^+B_n^+B_nB_n+\\&+T_{0,0,0,1}B_n^+B_n^+B_nB_{n+1}+T_{0,0,0,-1}B_n^+B_n^+B_nB_{n-1}+\\&+T_{0,1,1,1}B_n^+B_{n+1}^+B_{n+1}B_{n+1}+T_{0,-1,-1,-1}B_n^+B_{n-1}^+B_{n-1}B_{n-1}+\\&+T_{0,1,1,0}B_n^+B_{n+1}^+B_{n+1}B_n+T_{0,-1,-1,0}B_n^+B_{n-1}^+B_{n-1}B_n\Big]\,,\end{aligned}$$

(I 4.21)

gde je:

$$T_{0,0,0,0}=\frac{1}{N}\sum_{k}\frac{1}{N}\sum_{q}\frac{q^2}{|q|}\left[\frac{1}{E_e(k+q)-E_e(k)+E_p(q)}-\frac{1}{E_e(k+q)-E_e(k)-E_p(q)}\right],$$

(I 4.22)

$$\begin{aligned}T_{0,0,0,\pm 1}=\frac{1}{N}\sum_{k}e^{\mp ika}\frac{1}{N}\sum_{q}\frac{q^2e^{\mp iqa}}{|q|}\Big[&\frac{1}{E_e(k+q)-E_e(k)+E_p(q)}-\\&-\frac{1}{E_e(k+q)-E_e(k)-E_p(q)}\Big]\,,\end{aligned}$$

(I 4.23)

$$T_{0,\pm 1,\pm 1,\pm 1} = \frac{1}{N}\sum_{k} e^{\mp ika} \frac{1}{N}\sum_{q} \frac{q^2}{|q|}\Big[\frac{1}{E_e(k+q) - E_e(k) + E_p(q)} - \frac{1}{E_e(k+q) - E_e(k) - E_p(q)}\Big],$$

(I 4.24)

$$T_{0,\pm 1,\pm 1,0} = \frac{1}{N}\sum_{k} \frac{1}{N}\sum_{q} \frac{q^2 e^{\mp iqa}}{|q|}\Big[\frac{1}{E_e(k+q) - E_e(k) + E_p(q)} - \frac{1}{E_e(k+q) - E_e(k) - E_p(q)}\Big].$$

(I 4.25)

S obzirom na uvedene oznake ekvivalentni hamiltonijan (I 4.13) ćemo napisati u obliku:

$$H_{eq} = H_p + H_e^{n.n.} + H_2 + H_4 \, . \qquad \text{(I 4.26)}$$

Na ovom mestu izvršićemo grubu procenu ekvivalentnog hamiltonijana. Zanemarićemo disperziju eksitona tj. uzećemo $E_e(k+q) - E_e(k) = 0$, q i $|q|^2$ zamenićemo debajevskom vrednošću $q_D = \omega_D \vartheta_0^{-1}$,a eksponente $e^{\mp ika}$ i $e^{\mp iqa}$ ćemo ostaviti sa tekućim k i q . Pošto je $\sum_k e^{\pm ika} = \sum_q e^{\pm iqa} = 0$, lako dobijamo:

$$L_{0,0} = \frac{1}{2} T_{0,0,0,0} = \frac{1}{\hbar \vartheta_0}\,, \qquad \text{(I 4.27)}$$

$$L_{0,\pm 1} = T_{0,0,0,\pm 1} = T_{0,\pm 1,\pm 1,\pm 1} = T_{0,\pm 1,\pm 1,0} = 0 \, .$$

Da bismo uskladili oznake sa prethodnim tekstom u kome figuriše energija interakcije:

$$\chi = a(J_R - J_D) = \frac{a}{N}\sum_K (R_K - D_K)\, K \sin aK =$$

$$= 2a(R-D)\frac{1}{N}\sum_K K \sin aK \cos aK = -\frac{1}{2}(R-D)$$

u izrazima za H_2 i H_4 ćemo pisati:

$$(R-D)^2 = 4\chi^2 \,. \tag{I 4.28}$$

S obzirom na (I 4.27) i (I 4.28) ekvivalentni hamiltonijan (I 4.26) se može zapisati u obliku:

$$H_{eq} = H_p + \sum_n \left(\Delta_0 + 2D - \frac{2\chi^2}{\frac{1}{4}M v_0^2}\right) B_n^+ B_n - \frac{2\chi^2}{\frac{1}{4}M v_0^2}\sum_n B_n^+ B_n^+ B_n B_n \,. \tag{I 4.29}$$

Ako napišemo jednačinu kretanja $i\hbar \dot{B}_f = [B_f, H_{eq}]$ i predjemo u kontinuum po pravilima $B_f(t) \to B_f(x,t)$, $\dot{B}_f(t) = \frac{\partial B}{\partial t}$ i $B_{f\pm 1}(t) \to B \pm a\frac{\partial B}{\partial x} + a^2\frac{\partial^2 B}{\partial x^2}$ dolazimo do nelinearne Šredingerove jednačine:

$$i\hbar \frac{\partial B}{\partial t} = \left(\Delta_0 + 2D - 2R - \frac{2\chi^2}{\frac{1}{4}M v_0^2}\right) B - R a^2 \frac{\partial^2 B}{\partial x^2} -$$

$$- \frac{4\chi^2}{\frac{1}{4}M v_0^2} B^+ B B \,, \tag{I 4.30}$$

koja je potpuno analogna jednačini (I 3.18) iz prethodnog paragrafa ako se uzme $\vartheta_K^2 \sim \frac{3}{4}\,\vartheta_0^2$ .Pošto je jednačina (I 3.18) dobijena simetrizacijom $Bu = \frac{1}{2}(Bu + uB)$ rezultat (I 4.30) u potpunosti potvrdjuje neophodnost simetrizacije.

Jednačinu (I 4.30) dalje nećemo rešavati jer su postupak rešavanja i rešenja dati u prethodnom paragrafu. Ovde ćemo funkcije L i T potražiti tačnije nego što je to do sada učinjeno. Koristeći šemu (I 4.17) možemo pisati:

$$E_e(K+q) - E_e(K) \pm E_p(q) = Ra^2 q\left(q \pm \frac{q^{-1}|q|\hbar\vartheta_0 + \hbar\vartheta_K\cos\theta}{Ra^2}\right), \qquad \text{(I 4.31)}$$

gde je:

$$\vartheta_K = \frac{2a^2R}{\hbar}K, \qquad \text{(I 4.32)}$$

grupna brzina eksitona. Da bismo u analizu uključili neophodan uslov za nastanak solitona $\vartheta_K^2 < \vartheta_0^2$,prilikom izračunavanja veličina L i T koristićemo sledeće "obrezivanje":

$$\frac{1}{N}\sum_K \frac{1}{N}\sum_q G(\vartheta_K, q) \rightarrow \frac{a}{2\pi}\int_{-K_0}^{+K_0} dK\,\frac{a}{2\pi}\int_0^{\pi/2} dq\, G(\vartheta_K, q), \qquad \text{(I 4.33)}$$

gde je:

$$K_0 = \frac{\hbar\vartheta_0}{2Ra^2}, \qquad \text{(I 4.34)}$$

i dobijena je iz nejednakosti $v_k^2 < v_0^2$ .Ako još prilikom proračuna uzmemo u obzir da je $aK_0 \sim 10^{-1} - 10^{-2} \ll 1$ iz formula (I 4.19),(I 4.20),(I 4.22)-(I 4.25) dobijamo:

$$L_{0,0} = L_{0,\pm 1} = -\frac{2\chi^2 C_2}{M v_0^2} , \qquad \text{(I 4.35)}$$

$$T_{0,0,0,0} = T_{0,0,0,\pm 1} = T_{0,\pm 1,\pm 1,\pm 1} = T_{0,\pm 1,\pm 1,0} = -\frac{2\chi^2 C_4}{M v_0^2} , \qquad \text{(I 4.36)}$$

$$C_2 = 2\gamma^2\left(\frac{1}{6} - \ln \gamma\right) , \qquad \text{(I 4.37)}$$

$$C_4 = 2\gamma^3 , \qquad \text{(I 4.38)}$$

$$\gamma = \frac{\hbar v_0}{\pi a R} \sim 10^{-1} - 10^{-2} . \qquad \text{(I 4.39)}$$

S obzirom na procenjenu vrednost karakterističnog parametra γ dobijenu za $\pi R \sim 10^{-13}$ erg, $a \sim 3 \cdot 10^{-8}$ cm i $v_0 \sim 10^5 \, cm\, s^{-1}$,vidi se da H_4 ulazi u račun sa daleko manjom težinom nego H_2 .U prethodnoj,gruboj proceni koju smo napravili, H_2 i H_4 su bili množeni jednim te istim koeficijentom.

Zamenjujući (I 4.35) u (I 4.36) u izrazu (I 4.26) dobijamo:

$$H_{eq} = H_p + \left(\Delta_0 + 2D - \frac{2\chi^2 C_2}{M v_0^2}\right) \sum_n B_n^+ B_n -$$

$$- \left(R + \frac{2\chi^2 C_2}{M v_0^2}\right) \sum_n B_n^+ (B_{n+1} + B_{n-1}) -$$

$$- \frac{2\chi^2 C_4}{M v_0^2} \sum_n (B_n^+ B_n^+ B_n B_n + B_n^+ B_n^+ B_n B_{n+1} + B_n^+ B_n^+ B_n B_{n-1} +$$

$$+ B_n^+ B_{n+1}^+ B_{n+1} B_{n+1} + B_n^+ B_{n-1}^+ B_{n-1} B_{n-1} +$$

$$+ B_n^+ B_{n+1}^+ B_{n+1} B_n + B_n^+ B_{n-1}^+ B_{n-1} B_n). \qquad \text{(I 4.40)}$$

Ako jednačinu kretanja $i\hbar \dot{B}_f = [B_f, H_{eq}]$ usrednjimo po koherentnim eksitonskim stanjima:

$$|C_e\rangle = e^{-\sum_n (\overset{*}{\alpha}_n B_n - \alpha_n B_n^+)} |0_e\rangle , \qquad \text{(I 4.41)}$$

pri čemu je:

$$\langle C_e | B_f | C_e \rangle = \alpha_f , \quad \langle C_e | B_f^+ | C_e \rangle = \overset{*}{\alpha}_f ,$$

$$\langle C_e | \dot{B}_f | C_e \rangle = \dot{\alpha}_f , \qquad \text{(I 4.42)}$$

$$\langle C_e | B_f^+ B_g B_k | C_e \rangle = \langle C_e | B_f^+ | C_e \rangle \langle C_e | B_g | C_e \rangle \langle C_e | B_k | C_e \rangle = \overset{*}{\alpha}_f \alpha_g \alpha_k$$

za koherentne amplitude $\alpha_f(t)$ dobijamo sledeću jednačinu:

$$i\hbar \dot{\alpha}_f = \left(\Delta_0 + 2D - \frac{2\chi^2 C_2}{M v_0^2}\right) \alpha_f - \left(R + \frac{2\chi^2 C_2}{M v_0^2}\right) (\alpha_{f+1} + \alpha_{f-1}) -$$

$$-\frac{2\chi^2 C_4}{M v_0^2}\left(2\overset{*}{\alpha}_f \alpha_f \alpha_f + 2\overset{*}{\alpha}_f \alpha_f \alpha_{f+1} + 2\overset{*}{\alpha}_f \alpha_f \alpha_{f-1} + \right.$$

$$+\overset{*}{\alpha}_{f+1}\alpha_{f+1}\alpha_{f+1} + \overset{*}{\alpha}_{f-1}\alpha_{f-1}\alpha_{f-1} + \overset{*}{\alpha}_{f+1}\alpha_f \alpha_f + \overset{*}{\alpha}_{f-1}\alpha_f \alpha_f +$$

$$\left. +\overset{*}{\alpha}_{f+1}\alpha_{f+1}\alpha_f + \overset{*}{\alpha}_{f-1}\alpha_{f-1}\alpha_f + \overset{*}{\alpha}_{f+1}\alpha_f \alpha_{f+1} + \overset{*}{\alpha}_{f-1}\alpha_f \alpha_{f-1}\right). \qquad \text{(I 4.43)}$$

Napominjemo,da bismo usrednjavanjem jednačine $i\hbar \dot{B}_f = [B_f, H_{eq}]$ po normalnim eksitonskim stanjima izgubili nelinearnost jednačine i njeno rešenje bi bili ravni talasi,a ne talasni paketi.

Ako u (I 4.43) izvršimo kontinualnu aproksimaciju $\alpha_f(t) \rightarrow \alpha(x,t)$ dobijamo nelinearnu Šredingerovu jednačinu:

$$i\hbar \frac{\partial \alpha}{\partial t} = \mu \alpha - a^2 \nu \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} - \rho \Big\{ 7\overset{*}{\alpha}\alpha\alpha +$$

$$+ a^2 \Big[3\overset{*}{\alpha}\alpha \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} + 2\frac{\partial^2 \overset{*}{\alpha}}{\partial x^2}\alpha\alpha + 4\frac{\partial \overset{*}{\alpha}}{\partial x}\frac{\partial \alpha}{\partial x}\alpha + \overset{*}{\alpha}\left(\frac{\partial \alpha}{\partial x}\right)^2 \Big] \Big\},$$

(I 4.44)

gde je:

$$\mu = \Delta_0 + 2D - 2R - \frac{6\chi^2 C_2}{M v_0^2}, \qquad \text{(I 4.45)}$$

$$\nu = R + \frac{2\chi^2 C_2}{M v_0^2}, \qquad \text{(I 4.46)}$$

$$\rho = \frac{4\chi^2 C_4}{M v_0^2}. \qquad \text{(I 4.47)}$$

Jednačinu (I 4.44) ćemo rešavati smenom:

$$\alpha(x,t) = f(\xi)\, e^{ikx - i\omega t}, \qquad \xi = x - \frac{2a^2\nu}{\hbar} k t \tag{I 4.48}$$

gde je f kompleksna funkcija oblika:

$$f(\xi) = \Psi(\xi)\, e^{i\phi(\xi)}, \quad \overset{*}{\Psi} = \Psi, \quad \overset{*}{\phi} = \phi . \tag{I 4.49}$$

Posle zamene (I 4.48) jednačina (I 4.44) se separiše na dve jednačine i to:

$$\Psi'\phi'(1+3\varepsilon\Psi^2) + (1+\varepsilon\Psi^2)(\Psi'\phi' + \Psi\phi'') = -4\varepsilon\kappa\Psi^2\Psi',$$

$$\varepsilon = \frac{\rho}{\nu} \ll 1 \tag{I 4.50}$$

i

$$\Psi'' + 5\varepsilon\left[\Psi^2\Psi'' + \Psi\Psi'^2\right] =$$

$$= \Theta\Psi - 2\Omega\Psi^3 + \phi'^2\Psi + 2\varepsilon\phi'^2\Psi^3 + 4\kappa\varepsilon\phi'\Psi^3, \tag{I 4.51}$$

gde je:

$$\Theta = \frac{\mu + \nu a^2\kappa^2 - E}{a^2\nu}, \quad E = \hbar\omega,$$

$$\Omega = \frac{\rho}{2a^2\nu}(7 - 2a^2\kappa^2) = \frac{\varepsilon}{2a^2}(7 - 2a^2\kappa^2). \tag{I 4.52}$$

Rešenje jednačine (I 4.50) (uzeli smo

da je integraciona konstanta ravna nuli, da ne bismo pri $\zeta = \pm\infty$ dobili beskonačno veliku fazu ϕ) je:

$$\phi'(\zeta) = -\frac{\varepsilon\kappa\Psi^2(\zeta)}{\varepsilon\Psi^2(\zeta)+1} . \tag{I 4.53}$$

Ako (I 4.53) zamenimo u (I 4.51) dobićemo:

$$\Psi'' + 5\varepsilon\left[\Psi^2\Psi'' + \Psi\Psi'^2\right] =$$

$$= (\Theta + \kappa^2)\Psi - 2(\Omega + \varepsilon\kappa^2)\Psi^3 - \kappa^2\frac{\Psi}{(\varepsilon\Psi^2+1)^2} . \tag{I 4.54}$$

Posle smena:

$$\Psi' = J \quad , \quad \Psi'' = J\frac{d\zeta}{d\Psi} , \tag{I 4.55}$$

i

$$J^2 = Z \quad , \quad J\frac{dJ}{d\Psi} = \frac{1}{2}\frac{dZ}{d\Psi} , \tag{I 4.56}$$

jednačina (I 4.54) postaje:

$$\frac{dZ}{d\Psi} + \frac{10\varepsilon\Psi}{5\varepsilon\Psi^2+1}Z = \frac{2(\Theta+\kappa^2)}{5\varepsilon\Psi^2+1}\Psi - \frac{4(\Omega+\varepsilon\kappa^2)}{5\varepsilon\Psi^2+1}\Psi^3 - \frac{2\kappa^2}{5\varepsilon\Psi^2+1}\frac{\Psi}{(\varepsilon\Psi^2+1)^2} . \tag{I 4.57}$$

Rešenje ove jednačine tražimo u obliku:

$$Z = \frac{\lambda(\Psi)}{5\varepsilon\Psi^2+1} , \tag{I 4.58}$$

posle čega se ona svodi na:

$$\frac{d\lambda}{d\psi} = 2(\Theta+\kappa^2)\psi - 4(\Omega+\varepsilon\kappa^2)\psi^3 - \frac{2\kappa^2\psi}{(\varepsilon\psi^2+1)^2} \, . \qquad \text{(I 4.59)}$$

Prilikom integracije jednačine (I 4.59) vodićemo računa o tome pa tražimo takvo rešenje $\psi(\zeta)$ koje isčezava u beskonačnosti, tj. $\psi(\pm\infty)=0$. Zbog toga ćemo (I 4.59) integraliti u granicama od 0 do ψ . Rezultat integracije je:

$$\lambda(\psi) = \lambda(0) + (\Theta+\kappa^2)\psi^2 - (\Omega+\varepsilon\kappa^2)\psi^4 + \frac{\kappa^2}{\varepsilon}\left(\frac{1}{1+\varepsilon\psi^2} - 1\right), \qquad \text{(I 4.60)}$$

uz dopunski zahtev $\left.\frac{d\psi}{d\zeta}\right|_{\zeta=\pm\infty} = 0$, sledi $\lambda(0)=0$.

Kombinujući formule (I 4.60) (pri $\lambda(0)=0$), (I 4.58), (I 4.55) i (I 4.56), dolazimo do relacije:

$$\frac{d\psi}{\sqrt{(1+5\varepsilon\psi^2)^{-1}[(\Theta+\kappa^2)\psi^2 - (\Omega+\varepsilon\kappa^2)\psi^4 - \kappa^2\psi^2(1+\varepsilon\psi^2)^{-1}}} = d\zeta \, . \qquad \text{(I 4.61)}$$

Integracijom ove jednačine dobili bismo na njenoj levoj strani integral eliptičnog tipa čiju bi inverziju bilo veoma teško izvršiti. Zbog toga ćemo se u kvadratnom korenu koji figuriše u (I 4.61) ograničiti aproksimacijom linearnom po malom parametru ε . Tada se (I 4.61) svodi na :

$$\frac{d\Psi}{\sqrt{\Theta\Psi^2-(\Omega+\sigma\Theta)\Psi^4}}=d\xi\ , \qquad \sigma=5\varepsilon \ll 1 .$$

(I 4.62)

Pošto polazni hamiltonijan eksitonskog sistema (I 4.1) uzet u Hajtler-Londonovoj aproksimaciji, to znači da u sistemu egzistira samo jedno eksitonsko pobudjenje. Otuda $\sum_n B_n^+ B_n = \hat{1}$,gde je $\hat{1}$ jedinični operator u prostoru eksitonskih stanja. Ako ovaj uslov usrednjimo po koherentnim stanjima i predjemo na kontinualnu aproksimaciju, on se svodi na:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, \Psi^2(\xi) = a\ . \qquad \text{(I 4.63)}$$

Lako je zaključiti da je rešenje jednačine (jedino) (I 4.62), koje se može normirati uslovom (I 4.63), oblika:

$$\Psi(\xi)=\sqrt{\frac{\Theta}{\Omega+\sigma\Theta}}\ \frac{1}{ch\,\xi\sqrt{\Theta}}\ . \qquad \text{(I 4.64)}$$

Zamenom (I 4.64) u (I 4.63) dobijamo energiju talasnih paketa u obliku:

$$E_S(k) = E_{exc}(k) + E_N(k) + E_C(k)\ , \qquad \text{(I 4.65)}$$

gde je:

$$E_{exc}(\kappa) = \Delta - 2R + Ra^2\kappa^2, \quad \Delta = \Delta_0 + 2D, \tag{I 4.66}$$

$$E_N(\kappa) = -\frac{2\chi^2 C_2}{M v_0^2}\left(1 - \frac{1}{3}a^2\kappa^2\right), \tag{I 4.67}$$

$$E_C(\kappa) = -\frac{49\chi^4 C_4^2}{RM^2 v_0^4}\left(1 - \frac{2}{7}a^2\kappa^2\right)^2. \tag{I 4.68}$$

Normirana amplituda ima oblik:

$$\Psi(\zeta) = \frac{a}{2}\sqrt{\frac{\Omega}{1+\frac{5}{4}\tau}}\,\frac{1}{ch\,\frac{a\Omega}{2}\zeta}, \qquad \tau = \varepsilon a^2\Omega, \quad \tau \sim \varepsilon^2. \tag{I 4.69}$$

Dopunsku fazu ϕ talasnog paketa dobijamo zamenom (I 4.69) u (I 4.53) i integracijom po ζ .Rezultat je:

$$\phi(\zeta) = \phi_0 + \frac{\kappa}{2a\Omega}\sqrt{\frac{\tau}{1+\frac{3}{2}\tau}}\; ln\,\frac{\left(2\sqrt{\frac{1+\frac{3}{2}\tau}{\tau}}+1\right)\left(2\sqrt{\frac{1+\frac{3}{2}\tau}{\tau}} - th\,\frac{a\Omega}{2}\zeta\right)}{\left(2\sqrt{\frac{1+\frac{3}{2}\tau}{\tau}}-1\right)\left(2\sqrt{\frac{1+\frac{3}{2}\tau}{\tau}} + th\,\frac{a\Omega}{2}\zeta\right)}, \tag{I 4.70}$$

gde je ϕ_0 proizvoljna integraciona konstanta.

Ako se ograničimo aproksimacijom linearnom po ε ,normirana amplituda i faza mogu se,respektivno, napisati u sledećem obliku:

$$\Psi(\zeta) \approx \frac{a}{2}\sqrt{\Omega}\,\frac{1}{ch\,\frac{a\Omega}{2}\zeta}, \tag{I 4.71}$$

$$\phi(\zeta) = \phi_0 - \frac{a\kappa\varepsilon}{2}\, th\, \frac{a\Omega}{2}\zeta \,. \tag{I 4.72}$$

U ukazanim aproksimacijama normirana koherentna amplituda ima oblik:

$$\alpha(x,t) = \frac{a\sqrt{2}}{2}\, \frac{e^{i\kappa x - i\frac{E(\kappa)}{\hbar}t + i\left(\phi - \frac{a\kappa\varepsilon}{2} th \frac{a\Omega}{2}\zeta\right)}}{ch\, \frac{a\Omega}{2}\zeta} \,. \tag{I 4.73}$$

Rezimirajući rezultate dobijene metodom ekvivalentnog hamiltonijana, možemo zaključiti sledeće:

a) Do obrazovanja talasnih paketa može doći samo u prostoru koherentnih eksitonskih stanja. Takav zaključak je izveden i u paragrafu I 3.

b) Ako uzmemo $\Delta \sim 5\cdot 10^{-12}\,erg$, $R, \chi \sim 10^{-13}\,erg$, $M \sim 10^{-23}\,g$, $v_0 \sim 10^{5}\,cm\,s^{-1}$, onda prema formulama (I 4.66)-(I 4.68) sledi:

$$E_{exc} \sim 5\cdot 10^{-12}\,erg\,,$$
$$E_N \sim 5\cdot 10^{-15}\,erg\,,$$
$$E_c \sim 5\cdot 10^{-18}\,erg\,.$$

S obzirom da je E_c, koji predstavlja tipični solitonski član u energiji, veoma malo u odnosu na eksitonsku energiju, može se zaključiti da je za obrazovanje talasnih paketa dovoljna veoma mala energija reda $10^{-17}-10^{-18}$ erg ,a ne energija 10^{-14} erg kako sledi iz standardnih prilaza u teoriji eksitona.Takodje je jasno da energija talasnog paketa koja je ovde dobijena nije tako drastično snižena u odnosu na eksitonsku energiju kako to sledi u standardnoj teoriji.

c) U metodu ekvivalentnog hamiltonijana gubi se singularitet u solitonskoj energiji pri $v_K = v_0$ koja se pojavljuje u standarnim analizama teorije solitona.Nestajanje pomenutog singulariteta je posledica strožije primene perturbacionog metoda u okviru ovde izloženog prilaza.Solitonska popravka energije je po svojoj strukturi perturbaciona popravka drugog reda.Kao što se zna ovakva popravka se dobija sumiranjem po svim stanjima i to se prilikom rada sa ekvivalentnim hamiltonijanom i čini (sumiranje po q i K). U standardnom prilazu de facto figuriše samo jedan član perturbacione popravke za fiksirano K i otuda singularitet postoji.Treba naglasiti da u standardnom prilazu ne postoji mogućnost da se perturbaciona popravka sumira po svim stanjima.Nije isključeno da bi se anuliranje singulariteta u standardnom prilazu moglo postići tako što bi se umesto amplitude $\alpha_K(x,t) = f(x - v_K t)e^{iKx - i\omega t}$ uzela linearna superpozicija ovih amplituda po K .

I 5. NEODRŽANJE EKSITONA I SOLITONI

U svim dosadašnjim analizama hamiltonijan eksitonskog podsistema je zadavan u Hajtler-Londonovoj aproksimaciji /42/ koja pretpostavlja da eksitonski talas u sistemu nastaje od samo jednog pobudjenog molekula. Ako se predje na realističniju sliku /43/ u kojoj se pretpostavlja da svetlosni kvanti mogu da pobude više molekula istovremeno, onda Hajtler-Londonov eksitonski hamiltonijan dobija popravku proporcionalnu operatorskoj formi $(B^+B^+ + BB)$. Usled ove popravke operator ukupnog broja eksitona $\sum_n B_n^+ B_n$ ne komutira sa hamiltonijanom sistema i zato se pojavljuje problem koji se u literaturi naziva problem neodržanja eksitona.

Ako bismo u hamiltonijanu eksitonskog podsistema zadržali popravku tipa $(B^+B^+ + BB)$ to bi u solitonskoj analizi dovelo do nepremostivih računskih problema.

Da bi se ovi problemi lakše uočili izložićemo ukratko jedan drugi metod koji takodje dovodi do fundamentalnih solitonskih jednačina (I 2.23) i (I 2.25) iz drugog paragrafa. Ovaj metod sastoji se u sledećem: za jednočestičnu eksitonsku talasnu funkciju $|n_e\rangle = \sum_n A_n(t) B_n^+ |0_e\rangle$ piše se Šredingerova jednačina $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|n_e\rangle = H|n_e\rangle$ i na ovu jednačinu se s leva primeni operator $\langle 0_e | \overset{*}{A}_n(t)$ .Rezultat ovih operacija usrednji se po koherentnim fononskim stanjima $|C_p\rangle$ i posle prelaska na kontinuum dobija se jednačina (I 2.15).Kombinovana jednačina za fononske operatore usrednji se po stanjima $|n_e\rangle|C_p\rangle = |D(t)\rangle$ i po prelasku na kontinuum se dobija jednačina (I 2.23).

Ako se koristi ovakav prilaz u slučaju da hamiltonijan eksitonskog podsistema sadrži članove tipa $(B^+B^+ + BB)$ onda je jasno da se u izrazu $H|n_e\rangle$ pojavljuje tročestično eksitonsko stanje $B^{+3}|0_e\rangle$ koje bismo morali posebno da računamo,a tada bi se u izrazu za tročestičnu funkciju pojavila petočestična funkcija i lanac jednačina ne bi mogao da se zatvori.

Jedina mogućnost da se ovaj problem reši je prelazak od eksitonskog hamiltonijana koji ne održava kvazičestice na ekvivalentni hamiltonijan Hajtler-Londonovog tipa.Prilikom prelaska na ekvivalentni hamiltonijan, polazni eksitonski hamiltonijan sa neodržanjem ne sme biti uzet u aproksimaciji u kojoj su operatori Boze-operatori, jer to dovodi do grešaka na koje je više puta ukazivano u literaturi /52-54/.Prelaz na ekvivalentni hamiltonijan vrši se unitarnom transformacijom originalnog eksitonskog hamiltonijana u kome su eksitonski operatori Pauli-operatori ili imaju još složeniju kinematiku.Ovde ćemo se ograničiti dvonivoskom šemom molekulskih pobudjenja.Tada su eksitonski operatori Pauli-operatori,ako se razmatraju pobudjenja elektronskog podsistema izolovanog molekula.

U skladu sa teorijom Bogoljubova /41/ hamiltonijan jednodimenzionog molekulskog kristala u kome se svetlosnim kvantima pobudjuje elektronski podsistem molekula može se napisati u obliku:

$$H=\sum_{nS_1} \mathcal{E}_{S_1} a^+_{nS_1} a_{nS_1} -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{\substack{nm;\\ S_1S_2S_3S_4}} V_{nm}(S_1S_2S_3S_4)\, a^+_{nS_1} a_{nS_4} a^+_{mS_2} a_{mS_3} \ ,$$

$$S_1, S_2, S_3, S_4 \in 0, f \ , \quad V>0 \ . \qquad \text{(I 5.1)}$$

Ovde se pretpostavlja da pod dejstvom svetlosti molekul može da dospe iz osnovnog stanja 0 u samo jedno pobudjeno stanje karakterisano skupom kvantnih brojeva f .Operatori a^+_{nS} i a_{nS} su Fermi-operatori kreacije i anihilacije elektrona u stanju S u molekulu na čvoru n .Veličine $\mathcal{E}_{S_1}$ i $V_{nm}(S_1S_2S_3S_4)$ su date izrazima:

$$\mathcal{E}_{S_1} = \int dx_n \overset{*}{\varphi}_{S_1}(x_n) H_n \varphi_{S_1}(x_n) \qquad \text{(I 5.2)}$$

i

$$V_{nm}(S_1S_2S_3S_4) = \int dx_n\, dx_m\, \overset{*}{\varphi}_{S_1}(x_n) \overset{*}{\varphi}_{S_2}(x_m) \mathcal{D}(n-m) \varphi_{S_3}(x_m) \varphi_{S_4}(x_n) ,$$

(I 5.3)

gde je x_n-skup unutrašnjih koordinata molekula na čvoru n, $H_n(x_n)$-hamiltonijan izolovanog molekula koji ne zavisi od indeksa n jer su svi molekuli identični, $\varphi_n(x_n)$ -svojstvene funkcije hamiltonijana izolovanog molekula i $\mathcal{D}(n-m)$-operator dipol-dipolne interakcije izmedju molekula.Pošto se radi o izrazitom dielektriku pretpostavlja se da se funkcije φ_n slabo prekrivaju.Tada je hamiltonijan (I 5.1) zatvoren u podprostoru fermionskih stanja $\mathcal{H}=\{|1_0 0_f\rangle ; |0_0 1_f\rangle\}$ u kome očigledno važi:

$$a^+_{no}a_{no} + a^+_{nf}a_{nf} = 1 \ . \qquad \text{(I 5.4)}$$

Od operatora a^+ i a koji kreiraju i anihiliraju elektron u datom stanju u teoriji Bogoljubova se prelazi na operatore:

$$P^+_n = a^+_{nf}a_{no} \ , \quad P_n = a^+_{no}a_{nf} \ , \qquad \text{(I 5.5)}$$

koji kreiraju i anihiliraju pobudjenje na molekulu koji se nalazi na čvoru n .Lako je pokazati da su operatori P^+ i P Pauli-operatori i da zadovoljavaju komutacione relacije:

$$\left[P_n, P^+_m\right] = (1 - 2P^+_n P_n)\,\delta_{nm} \ ,$$

$$\left[P_n, P_m\right] = \left[P^+_n, P^+_m\right] = 0 \ , \quad P^2_n = P^{+2}_m = 0 \ . \qquad \text{(I 5.6)}$$

Prilikom izvodjenja relacija (I 5.6) koristi se činjenica da operatori a^+ i a deluju u podprostoru $\mathcal{H}$.

Ako se u hamiltonijanu (I 5.1) predje na operatore P^+ i P onda se u kvadratnu formu hamiltonijana po operatorima P uključi veliki deo interakcija Fermi-operatora iz forme četvrtog reda iz (I 5.1).Prelaz na Pauli-operatore vrši se tako što se u (I 5.1) razvijaju sume po indeksima S_i i koriste formule (I 5.4) i (I 5.5).Pretpostavićemo da posmatrani sistem ima centar inverzije i da se ovaj poklapa sa centrom inverzije izolovanog molekula.Tada su svi matrični elementi $V_{nm}(S_1 S_2 S_3 S_4)$ u kojima je samo jedno S ravno f ili samo jedno S ravno O ,jednaki nuli / 42,43/.

U skladu sa navedenim,hamiltonijan (I 5.1) zapisan preko Pauli-operatora ima oblik:

$$H_e = E_{eo} + \sum_n (\Delta_o + \sum_m D_{nm}) P_n^+ P_n - \sum_{nm} R_{nm} P_n^+ P_m -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{nm} S_{nm} (P_n^+ P_m^+ + P_n P_m) - \sum_{nm} T_{nm} P_n^+ P_n P_m^+ P_m \quad ,$$

(I 5.7)

gde je:

$$E_{eo} = N\mathcal{E}_o - \frac{1}{2} \sum_{nm} V_{nm}(oooo) \; ,$$

$$\Delta_o = \mathcal{E}_f - \mathcal{E}_o \; ,$$

$$D_{nm} = V_{nm}(oooo) - \frac{1}{2} V_{nm}(foof) - \frac{1}{2} V(offo) \; , \qquad \text{(I 5.8)}$$

$$S_{nm} = V_{nm}(ffoo) + V(ooff) \; ,$$

$$R_{nm} = \frac{1}{2} V_{nm}(fofo) + \frac{1}{2} V_{nm}(ofof) \; ,$$

$$T_{nm} = \frac{1}{2} V_{nm}(ffff) + \frac{1}{2} V_{nm}(oooo) - \frac{1}{2} V_{nm}(foof) - \frac{1}{2} V_{nm}(offo) .$$

Hamiltonijan (I 5.7) u kome su koeficijenti D, R, S i T realni i simetrični,odnosi se na "zamrznut" kristal.Da bismo uzeli u obzir oscilovanje molekula koje nastaje usled povišenja temperature uzimamo $n \to n + u_n$ i $m \to m + u_m$ i matrične elemente dipol-dipolne interakcije razvijamo po šemi:

$$\phi_{nm} \equiv \phi_{n-m+(u_n - u_m)} = \frac{1}{N} \sum_K \phi_K e^{iK(n-m)a + K(u_n - u_m)} \approx \qquad \text{(I 5.9)}$$

$$\approx \phi_{nm} + i \frac{1}{N} \sum_K K \phi_K e^{iK(n-m)a} (u_n - u_m) , \qquad \phi \equiv D, R, S, T .$$

gde je N -broj molekula u kristalu i a -konstanta rešetke. Kao što se vidi u (I 5.9) smo se ograničili aproksimacijom linearnom po molekulskim pomerajima u .

Rezultat ukazane procedure je hamiltonijan $H_e^{(1)}$ u koji su uključeni i eksitonski podsistem i interakcija eksitona sa fononima. Oblik hamiltonijana $H_e^{(1)}$ je sledeći:

$$H_e^{(1)} = E_{e0} + \sum_n \hat{g}_n P_n^+ P_n - \sum_{nm} \hat{\alpha}_{nm} P_n^+ P_m -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{nm} \hat{\beta}_{nm} (P_n P_m + P_m^+ P_n^+) - \sum_{nm} \hat{\gamma}_{nm} P_n^+ P_n^+ P_m P_m \ , \tag{I 5.10}$$

gde su upotrebljene oznake:

$$\hat{g}_n = \Delta + \hat{F}_n \ , \quad \Delta = \mathcal{E}_f - \mathcal{E}_0 + D_0 \ , \quad D_0 = \sum_{nm} D_{nm} \ ,$$

$$\hat{F}_n = \frac{i}{N} \sum_k k D_k e^{ika(n-m)} (u_n - u_m) \ , \quad \hat{F} = \hat{F}_n^+ \ , \quad \hat{g}_n = \hat{g}_n^+ \ ,$$

$$\hat{\alpha}_{nm} = R_{nm} + \frac{i}{N} \sum_k k R_k e^{ika(n-m)} (u_n - u_m) \ , \quad \hat{\alpha}_{nm} = \hat{\alpha}_{mn} = \hat{\alpha}_{nm}^+ \ ,$$

$$\hat{\beta}_{nm} = S_{nm} + \frac{i}{N} \sum_k k S_k e^{ika(n-m)} (u_n - u_m) \ , \quad \hat{\beta}_{nm} = \hat{\beta}_{mn} = \hat{\beta}_{nm}^+ \ ,$$

$$\hat{\gamma}_{nm} = T_{nm} + \frac{i}{N} \sum_k k T_k e^{ika(n-m)} (u_n - u_m) \ , \quad \hat{\gamma}_{nm} = \hat{\gamma}_{mn} = \hat{\gamma}_{nm}^+ . \tag{I 5.11}$$

Totalni hamiltonijan sistema interagujućih eksitona i fonona je dat sa:

$$H = H_e^{(1)} + H_p \ , \tag{I 5.12}$$

gde je:

$$H_p = \frac{1}{2M}\sum_n p_n^2 + \frac{Q}{2}\sum_n (u_n - u_{n-1})^2 , \qquad \text{(I 5.13)}$$

hamiltonijan fononskog podsistema.U formuli (I 5.13) p_n je molekulski impuls, M je masa molekula i Q je konstanta sile.

Od hamiltonijana (I 5.12) preći ćemo na ekvivalentni hamiltonijan oblika:

$$H_{eq} = e^{-\hat{C}} H \, e^{\hat{C}} , \qquad \text{(I 5.14)}$$

gde je $\hat{C}$ antiermitski operator $\hat{C}^+ = -\hat{C}$ .Operator $\hat{C}$ uzećemo u formi:

$$\hat{C} = \hat{C}_1 - \hat{C}_1^+ , \quad \hat{C}_1 = \sum_{ab} \hat{Y}_{ab} P_a P_b , \quad \hat{Y}_{ab} = \hat{Y}_{ba} = \hat{Y}_{ab} , \quad \hat{Y}_{aa} = 0 . \qquad \text{(I 5.15)}$$

Operator $\hat{Y}_{ab}$ odredićemo tako da svi članovi proporcionalni $(P^+P^+ + PP)$ iščeznu iz ekvivalentnog hamiltonijana.Da bismo ovo postigli sa tačnošću do stepena malog parametra $\frac{\Phi}{\Delta}$ gde ϕ uzima vrednost D, R, S, T i vrednost fononske energije,dovoljno je da izraz (I 5.14) računamo u aproksimaciji:

$$H_{eq} = H - [\hat{C}, H] + \frac{1}{2}[\hat{C}, [\hat{C}, H]] . \qquad \text{(I 5.16)}$$

Zamenom (I 5.15) u (I 5.16) dobijamo uslov za eliminaciju članova proporcionalnih $(P^+P^+ + PP)$ iz ekvivalentnog hamiltonijana.Ovaj uslov glasi:

$$2\hat{Y}_{ab}(\hat{g}_a - \hat{\gamma}_{ab}) = -\frac{1}{2}\hat{\beta}_{ab} - [\hat{Y}_{ab}, H_p] + 2\sum_m \hat{Y}_{am}\hat{\alpha}_{mb} , \qquad \text{(I 5.17)}$$

i on se,posle primene s leva operatora:

$$(\hat{g}_a-\hat{\varepsilon}_{ab})^{-1}\approx\frac{1}{\Delta}\left(1-\frac{\hat{F}_a-\hat{\varepsilon}_{ab}}{\Delta}\right)\approx\frac{1}{\Delta}$$, svodi na:

$$\hat{Y}_{ab}=-\frac{\hat{\beta}_{ab}}{4\Delta}-\frac{[\hat{Y}_{ab},H_p]}{2\Delta}+\frac{1}{\Delta}\sum_m\hat{Y}_{am}\hat{\alpha}_{mb}\,. \tag{I 5.18}$$

Primenom iterativnog postupka na jednačinu (I 5.18)dolazimo do konačnog oblika eliminacionog operatora Y :

$$\hat{Y}_{ab}=-\frac{\hat{\beta}_{ab}}{4\Delta}+O\left(\frac{\Phi^2}{\Delta^2}\right)\,. \tag{I 5.19}$$

Ako (I 5.19) uvrstimo u (I 5.16) i odbacimo članove proporcionalne $\left(\frac{\Phi}{\Delta}\right)^2$ a takodje i članove četvrtog reda po Pauli-operatorima , dobijamo ekvivalentni hamiltonijan u obliku:

$$H_{eq}=E_{e0}-\frac{1}{4\Delta}\sum_{nm}\hat{\beta}^2_{nm}+\sum_n(\hat{g}_n+\hat{L}_n)P_n^+P_m-$$
$$-\sum_{nm}\left(\hat{\alpha}_{nm}+\frac{1}{2}\hat{\lambda}_{nm}\right)P_n^+P_m+\frac{1}{2M}\sum_n p_n^2+\frac{Q}{2}\sum_n(u_n-u_{n-1})^2, \tag{I 5.20}$$

gde je:

$$\hat{L}_n=\frac{1}{\Delta}\sum_m\hat{\beta}^2_{nm}\,, \tag{I 5.21}$$

$$\hat{\lambda}_{nm}=\frac{1}{\Delta}\sum_l\hat{\beta}_{nl}\hat{\beta}_{lm}\,. \tag{I 5.22}$$

Ekvivalentni hamiltonijan (I 5.20) prevešćemo na formu koja se koristi pri analizi solitona. To znači da ćemo Pauli-operatore P^+ i P zameniti Boze-operatorima B^+ i B, uzeti aproksimaciju najbližih suseda i aproksimaciju linearnu po fononskim pomerajima u hamiltonijanu interakcije eksitona i fonona. Tako dobijamo sledeći ekvivalentni hamiltonijan u Hajtler-Londonovoj formi:

$$H_{eq} = E_{oe} - \frac{N}{2}\frac{S^2}{\Delta} + \sum_n \left(\Delta + \frac{2S^2}{\Delta}\right) B_n^+ B_n - R\sum_n B_n^+ (B_{n+1} + B_{n-1}) +$$

$$+ \frac{1}{2M}\sum_n p_n^2 + \frac{Q}{2}\sum_n (u_n - u_{n-1})^2 +$$

$$+ J_R \sum_n (B_n^+ B_{n-1} + B_{n-1}^+ B_n)(u_n - u_{n-1}) - \left(J_D + \frac{2SJ_S}{\Delta}\right)\sum_n B_n^+ B_n (u_{n+1} - u_{n-1}),$$

$$\Delta = \mathcal{E}_f - \mathcal{E}_o + 2D, \tag{I 5.23}$$

gde je:

$$J_D = N^{-1}\sum_k k D_k \sin ak,$$

$$J_R = N^{-1}\sum_k k R_k \sin ak, \tag{I 5.24}$$

$$J_S = N^{-1}\sum_k k S_k \sin ak.$$

Kao i ranije uzećemo da je $R>0$ što znači da pretpostavljamo da eksitoni imaju pozitivnu masu. Što se tiče znaka D on ostaje ne odredjen (može da bude i pozitivan i negativan). Pošto je izraz za D dat u formuli (I 5.8) moglo bi se proceniti za kakva stanja f on ima pozitivan a za kakva negativan znak. U teoriji Davidova, a takodje i u radovima Takena /55,56/ pretpostavlja se da je $D>0$.

Ako za jednočestičnu eksitonsku funkciju:

$$|n_e\rangle = \sum_n A_n(t) B_n^+ |0_e\rangle , \quad \sum_n |A_n(t)|^2 = 1 , \tag{I 5.25}$$

napišemo Šredingerovu jednačinu $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n_e\rangle = H |n_e\rangle$,
i usrednjimo je po koherentnim fononskim stanjima:

$$|C_p\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\sum_n [\varrho_n(t) p_n - \pi_n(t) u_n]} |0_p\rangle , \tag{I 5.26}$$

gde je $|0_p\rangle$ fononski vakum, u, ϱ i π realne funkcije, posle prelaska u kontinuum dobijamo jednačinu:

$$i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} = (E_g + \Delta + \frac{2S^2}{\Delta} - 2R + C) A - a^2 R \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + 2\chi_0 A \frac{\partial \varrho}{\partial x} , \tag{I 5.27}$$

gde je:

$$E_g = E_{e0} + \frac{1}{2}\sum_K \hbar\omega_K , \quad \omega_K = v_0 |K| , \quad v_0^2 = a^2 \frac{Q}{M} , \tag{I 5.28}$$

$$C = \frac{1}{2a} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\frac{1}{M} \left(\frac{\partial \varrho}{\partial t}\right)^2 + a^2 Q \left(\frac{\partial \varrho}{\partial t}\right)^2 \right] , \tag{I 5.29}$$

i renormalizovana energija interakcije χ_0 ima oblik:

$$\chi_0 = (J_R - J_D - \frac{2S J_S}{\Delta}) a . \tag{I 5.30}$$

Kombinovana jednačina kretanja za fononske operatore p i u usrednjena po stanjima $|n_e\rangle |C_p\rangle$ i zapisana u kontinualnoj aproksimaciji glasi:

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - v_0^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = \frac{2\chi_0}{M} \frac{\partial}{\partial x} |A|^2 . \qquad \text{(I 5.31)}$$

Postupak rešavanja sistema jednačina (I 5.27) i (I 5.31) detaljno je opisan u drugom paragrafu pa se na njemu nećemo zadržavati. Navešćemo samo završne rezultate.

Konstanta C data je izrazom:

$$C = \frac{2}{3} \frac{1+\nu_K^2}{1-\nu_K^2} \frac{\chi_0^4}{RM^2 v_0^4 (1-\nu_K^2)^2} , \quad \nu_K^2 = \left(\frac{v_K}{v_0}\right)^2 , \quad v_K = \frac{2a^2 R}{\hbar} K . \qquad \text{(I 5.32)}$$

Energija solitona može se zapisati u obliku:

$$E_S(K) = E_S(0) + \frac{1}{2} m_S v_K^2 , \qquad \text{(I 5.33)}$$

gde je:

$$E_S(0) = E_{exc}(0) - \frac{\chi_0^4}{3RQ^2a^4} ,$$

$$E_{exc}(0) = \Delta - 2R + \frac{2S^2}{\Delta} , \qquad \text{(I 5.34)}$$

i izraz za efektivnu masu solitona glasi:

$$m_S = m_{exc} + \frac{4\chi_0^4}{3RQ^2a^4 v_0^2} ,$$

$$m_{exc} = \frac{\hbar^2}{2Ra^2} , \quad v_0^2 = a^2 \frac{Q}{M} . \qquad \text{(I 5.35)}$$

Pošto je u Davidovljevoj teoriji interakciona energija $\chi = a(J_R - J_D)$,a u slučaju neodržanja je data sa $\chi_0 = a(J_R - J_D - \frac{2SJ_S}{\Delta})$ .Očigledno je $|\chi_0| < |\chi|$. Na osnovu formula (I 5.34) i (I 5.35) možemo zaključiti da je u slučaju neodržanja prag energije za pobudjenje solitona viši od odgovarajućeg praga energije za sistem u kome se eksitoni održavaju i da neodržanje smanjuje efektivnu solitonsku masu.Takodje je interesantno proceniti na koji način neodržanje utiče na širinu zone obuhvaćene solitonskim pobudjenjem.U referenci /3/ daje se izraz za širinu zone $\delta = \pi a^3 Q R \chi^{-2}$.Pošto je u slučaju neodržanja $|\chi_0| < |\chi|$ očigledno je da se efekti neodržanja manifestuju i time što se soliton "razmazuje"jer je u ovom slučaju širina zone obuhvaćene solitonom veća od odgovarajuće širine kada se broj eksitona održava.

Na kraju ovog paragrafa analiziraćemo rezultate iz radova /55,56/,jer je u ovim radovima uzeto u obzir neodržanje eksitona,mada na jedan specifičan način.U pomenutim radovima Takena, se Pauli-operatorima zamenjuju spinskim operatorima $P^+ = \sigma^x + i\sigma^y$, $P = \sigma^x - i\sigma^y$, $P^+P \to \frac{1}{2} + \sigma^z$ i analizira se jednačina kretanja za operatore σ^x , P i u .Pošto je σ^x ermitski operator,umesto nelinearne Šredingerove jednačine dobija se nelinearna jednačina Klajn-Gordonovog tipa u kojoj figuriše drugi izvod po vremenu.Usled aproksimacije $\sigma^z \approx -\frac{1}{2}$,Takeno za $S = R$ dobija izraz za unutrašnju eksitonsku energiju $E^{(T)}_{exc}(0) = \Delta - 2R - \frac{2R^2}{\Delta} + O(\frac{\Phi^2}{\Delta^2})$ koji je dijametralno suprotan rezultatu (I 5.34) koji je dobijen u našoj analizi.Ovaj rezultat je isti kao rezultat metoda približne druge kvantizacije u kome se u formuli (I 5.7) Pauli-operatori zamenjuju

Boze-operatorima i eksitonski spektar nalazi dijagonalizacijom /42,43/.Na nekorektnost ovog prilaza se u literaturi više puta ukazivalo / 52-54,57/.Pošto je $E^{(T)}_{exc}(0) < E_{exc}(0)$ dobijenog ovde izlazi ,da se po Takenovoj teoriji solitoni mogu pobudjivati kvantima niže energije nego što to predvidja ovde izvedeni račun.

Iz formula (22) i (13) iz /55/ može se zaključiti da je interakciona energija data izrazom:

$$\chi_T^2 = \frac{a^2}{2}(J_R - J_D)(3J_R - 2J_D) - \frac{Ra^2}{\Delta}(J_D^2 + J_D J_R - 3J_R^2) \,. \tag{I 5.36}$$

Ovaj rezultat se bitno razlikuje i od $\chi_D^2 = a^2(J_R - J_D)^2$ i od $\chi_0^2 = a^2(J_R - J_D - \frac{2SJ_S}{\Delta})^2$.Osnovna uočljiva razlika sastoji se u tome što prema Takenovoj teoriji solitoni ne mogu da nastanu za $1 < \frac{J_D}{J_R} < \frac{3}{2}$,jer u ovom intervalu χ_T dobija imaginarnu vrednost.Zbog ove činjenice teško je nastaviti poredjenje Takenovih rezultata sa rezultatima drugog paragrafa i rezultatima dobijenim ovde.Treba naglasiti da pored grube aproksimacije $\sigma^2 = -\frac{1}{2}$ Takeno vrši i aproksimaciju rotacionih talasa da bi Klajn-Gordonovu jednačinu preveo u nelinearnu Šredingerovu jednačinu.Posledice ove aproksimacije teško se mogu kontrolisati i dovoljno nejasan rezultat (I 5.36) je po svoj prilici proizašao usled primene aproksimacije rotacionih talasa.

I 6. EKSITONSKI I HIBRIDNI SOLITONI

U okviru kvaziklasične teorije solitona (drugi paragraf) veličina:

$$C = \frac{1}{2}\sum_n \left[\frac{\pi_n^2}{M} + Q(\beta_n - \beta_{n-1})^2 \right] \rightarrow \frac{M(v_0^2 + v_K^2)}{2a} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \left(\frac{\partial \beta}{\partial \xi} \right)^2 , \tag{I 6.1}$$

koja fizički predstavlja ukupnu energiju koherentne deformacije kristala uključena je u energiju solitona bez posebnih komentara i tako je dobijen izraz (I 2.41) za solitonsku energiju. Ovde je postojala mogućnost da se veličina C uklјiči u energiju osnovnog stanja, kao njena popravka, i tada bi u skladu sa (I 2.41) izraz za energiju solitona glasio:

$$\tilde{E}_{S(K)} = E_{exc(K)} - \frac{\chi^4}{R Q^2 a^4 (1 - \nu_K^2)^2} \, . \tag{I 6.2}$$

Dilemu **koja** očigledno ovde može da nastane Davidov je rešio na isti način kako su to učinili Pekar i Landau u teoriji polarona /58-61/. U teoriji polarona elektron izaziva polarizaciju rešetke i kreće se kroz rešetku zajedno sa stvorenim poljem polarizacije.Ako se razmatra energija ovakvog pobudjenja,dobija se izraz za energiju analogan izrazu (I 6.2).Ispostavilo se da više odgovara eksperimentalnim činjenicama pobudjenje u čiju je energiju uključena i kinetička energija polarizacije.Otuda se za energiju polarona uzima suma energije elektrona koja "vuče" polje polarizacije i kinetičke energije same polarizacije.U slučaju solitona to bi značilo da se izrazu (I 6.2) dodaje veličina C (I 6.1) kako je to i učinjeno u drugom paragrafu.Držeći se analogije sa polaronima može se reći da energija (I 6.2) predstavlja energiju eksitona koji se kreće zajedno sa poljem deformacije (ovakav soliton nazivaćemo dalje eksitonskim solitonom),dok energija $\tilde{E}_s(\kappa) + C$ odgovara polaronu kome je dodata kinetička energija polarizacije.Soliton sa ovom energijom zvaćemo hibridnim solitonom ili prosto solitonom.

Uključivanje veličine C u energiju eksitonskog solitona daje pravo da se energija hibridnog solitona piše u obliku:

$$E_{hs}(\kappa) = E_{hs}(0) + \frac{1}{2} m_{hs} v_\kappa^2 ,$$

gde je v_κ-grupna brzina eksitona.To znači da hibridni soliton i eksiton imaju istu brzinu.Ovo se lako može pokazati na osnovu izraza (I 2.20) za usrednjeni hamiltonijan sistema.Ako u ovom izrazu uzmemo $\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} = -\kappa^2 A$ on postaje:

$$\mathcal{H}(t) = \frac{1}{a}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[H_{oe} + H_{op} + C + \Delta - 2R + 2\chi \frac{\partial \beta}{\partial x} + R a^2 \kappa^2 \right] \overset{*}{A} A \tag{I 6.3}$$

Izraz (I 6.3) potpuno je analogan klasičnoj Hamiltonovoj funkciji iz koje se brzina odredjuje kao $\dot{q} = \frac{\partial \mathcal{H}_c}{\partial p}$, što bi u datom slučaju značilo:

$$\vartheta = \frac{\partial \mathcal{H}(t)}{\partial(\hbar\kappa)} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathcal{H}(t)}{\partial \kappa} = \frac{2Ra^2\kappa}{\hbar}\frac{1}{a}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,|A|^2 = \frac{2Ra^2\kappa}{\hbar} = \vartheta_\kappa \,. \tag{I 6.4}$$

Znači u okviru kvaziklasičnog formalizma, kako je to ovde demonstrirano, eksiton i hibridni soliton kreću se istom brzinom.

Što se tiče eksitonskog solitona, najprirodnije je da mu se grupna brzina iz zakona disperzije odredjuje na osnovu formule:

$$\vartheta = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial x} \,, \tag{I 6.5}$$

a efektivna masa kao:

$$m = \left(\frac{\partial^2 E}{\partial p^2}\right)^{-1} = \hbar^2\left(\frac{\partial^2 E}{\partial \kappa^2}\right)^{-1} , \tag{I 6.6}$$

jer mu se zakon disperzije računa sa tačnošću do kvadrata talasnog vektora κ .

U okviru kvantne teorije solitona (treći paragraf) korišćen je metod jednačina kretanja i dobijeni izraz za energiju (I 3.30) predstavlja energiju eksitonskog solitona sa kvantnim popravkama. Odgovarajuća energija hibridnog solitona koji se kreće istom brzinom kao eksiton dobila bi se dodavanjem veličine C energiji datoj izrazom (I 3.30).

Posle ovih napomena možemo uporediti rezultate koje daje kvaziklasični prilaz i kvantni prilaz u teoriji solitona. Prvo ćemo napraviti poredjenje izmedju kvaziklasičnog i kvantnog izraza za energiju hibridnih solitona.

Kvaziklasični izraz za energiju hibridnih solitona sa tačnošću do $(aK)^2$ zaključno, dat je izrazom (I 2.49) koji ćemo napisati u nešto izmenjenom obliku:

$$E_{hs}^{(c)}(K) = E_{hs}^{(c)}(0) + \frac{1}{2} m_{hs}^{(c)} v_K^2 , \tag{I 6.7}$$

gde je:

$$E_{hs}^{(c)}(0) = \Delta - 2R - \frac{\chi^4}{3RQ^2a^4} , \tag{I 6.8}$$

prag energije za pobudjivanje solitona, i

$$m_{hs}^{(c)} = m_{exc} + \frac{4\chi^4}{3RQ^2a^4v_0^2} , \tag{I 6.9}$$

efektivna masa hibridnih solitona.

Ako veličini $E_s(K)$ (formula (I 3.30)) dodamo veličinu C (formula (I 2.40)) i zadržimo se na članovima proporcionalnim $(aK)^2$ zaključno, dobijamo kvantni izraz za energiju hibridnih solitona:

$$E_{hs}^{(q)}(K) = E_{hs}^{(q)}(0) + \frac{1}{2} m_{hs}^{(q)} v_K^2 , \tag{I 6.10}$$

gde je:

$$E_{hs}^{(q)}(0) = \Delta - 2R - \frac{\chi^4}{3RQ^2a^4}\left(1 + \frac{6RQa^2}{\chi^2}\right), \tag{I 6.11}$$

prag energije, i

$$m_{\hbar s}^{(q)} = m_{exc} + \frac{4\chi^4}{3RQ^2a^4v_0^2}\left(1 - \frac{3QRa^2}{\chi^2}\right), \tag{I 6.12}$$

efektivna masa.

Poredjenjem izraza (I 6.8) i (I 6.11) možemo zaključiti da se prema kvantnoj teoriji hibridni soliton može lakše obrazovati nego što to predvidja kvaziklasična teorija ($E_{\hbar s}^{(q)}(0) < E_{\hbar s}^{(c)}(0)$). Što se tiče efektivne mase zaključujemo da je prema kvaziklasičnom prilazu solitonska efektivna masa veća od eksitonske, dok prema kvantnoj teoriji ona može da bude i veća i manja od eksitonske u zavisnosti od karakterističnih parametara sistema. Ako je $|\chi| > a\sqrt{3RQ}$ onda je prema kvantnoj teoriji efektivna masa solitona veća od efektivne mase eksitona dok je pri $|\chi| < a\sqrt{3RQ}$ situacija obrnuta. To znači da veličina efektivne mase solitona prema kvantnoj teoriji bitno zavisi od veličine interakcione energije $|\chi|$ i to tako da jača eksiton-fonon interakcija dovodi do težih solitona. Nezavisno od toga kvantna teorija daje manju masu solitona nego kvaziklasična.

Sada možemo napraviti poredjenje kvaziklasične i kvantne teorije eksitonskih solitona. Na osnovu formule (I 6.2) uzete sa tačnošću do $(aK)^2$ zaključno, možemo pisati za kvaziklasičnu energiju eksitonskih solitona:

$$E_{es}^{(c)}(K) = E_{es}^{(c)}(0) + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_{es}^{(c)}}, \tag{I 6.13}$$

gde je:

$$E_{es}^{(c)}(0) = \Delta - 2R - \frac{\chi^4}{RQ^2a^4} , \qquad (I\ 6.14)$$

i

$$m_{es}^{(c)} = m_{exc} + \frac{4\chi^4}{RQ^2a^4v_0^2} , \qquad (I\ 6.15)$$

pri čemu je $m_{es}^{(c)}$ dobijeno po formuli (I 6.6).

Ako formulu (I 3.30) napišemo sa tačnošću do $(a\kappa)^2$ zaključno,dobijamo kvantni izraz za energiju eksitonskog solitona:

$$E_{es}^{(q)}(\kappa) = E_{es}^{(q)}(0) + \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m_{es}^{(q)}} , \qquad (I\ 6.16)$$

gde je:

$$E_{es}^{(q)}(0) = \Delta - 2R - \frac{\chi^4}{RQ^2a^4}\left(1 + \frac{2Qa^2R}{\chi^2}\right), \qquad (I\ 6.17)$$

i

$$m_{es}^{(q)} = m_{exc} + \frac{4\chi^4}{RQ^2v_0^2a^4}\left(1 + \frac{Qa^2R}{\chi^2}\right) \qquad (I\ 6.18)$$

pri čemu je $m_{es}^{(q)}$ dobijeno po formuli (I 6.6).

Poredjenjem kvaziklasičnih i kvantnih formula za eksitonski soliton možemo zaključiti da je prag energije za pobudjivanje eksitonskog solitona niži u okvirima kvantne teorije i da mu je efektivna masa veća u okvirima ove iste teorije.

Rezimirajući sve navedeno možemo zaključiti da se kvaziklasična i kvantna teorija solitona kvalitativno dobro slažu.Moglo bi se reći,na osnovu izraza koji su ovde dobijeni,da kvantna teorija prelazi u kvaziklasičnu pri $\chi \to \infty$ .U svakom slučaju,pri $\frac{a\sqrt{RQ}}{|\chi|} = \frac{v_0\sqrt{MR}}{|\chi|} \ll 1$, a to znači u kristalima sa uskom eksitonskom zonom i slabog elasticiteta,slaganje postaje kvantitativno.Pošto se danas uglavnom radi u okvirima kvaziklasičnog prilaza,mi ćemo se u daljim analizama ograničiti ovom varijantom teorije solitona.To nam daje mogućnost da rezultate poredimo sa rezultatima drugih autora.Osim toga,pošto nam je cilj, pored ostalog, i analiza vezanih solitonskih stanja za koje je teško,ako ne i nemoguće vršiti kvantnu analizu,izbor kvaziklasičnog prilaza kao metoda rada omogućuje nam da dobijemo bar kvalitativne izraze iz ove oblasti solitonske teorije.Takodje će u daljem biti analizirani hibridni solitoni pri čemu ćemo ih prosto nazivati solitonima ukoliko ne bude bilo potrebe da se porede sa eksitonskim solitonima.

G L A V A II

S P E C I F I Č N I T I P O V I S O L I T O N A

II 1. SOLITONI U α-PROTEINIMA

Alfa spiralni proteinski molekuli predstavljaju najizraženiji oblik kvaziperiodične molekulske strukture. Kroz ovakvu strukturu vrši se prenos energije hidrolize adenozintrifosfata (ATP) koja iznosi oko 0,43 eV i veća je oko dvadeset puta od kvanata toplptne energije fiziološke temperature. Prenos ovako visoke energije očigledno igra dominantnu ulogu u biološkim procesima pa je preduzet niz istraživanja /4,5,56/ sa ciljem da se razjasni mehanizam ovog procesa.

Ovde ćemo se zadržati na analizama koje su izvršene u /4,5/. U ovim radovima je na osnovu eksperimentalnih podataka o rasporedu peptidnih grupa u α-proteinskoj spirali, sama spirala je aproksimirana sa tri lanca peptidnih grupa, koje medjusobno interaguju preko vodoničnih veza. S obzirom na navedeni red veličine energije hidrolize ATP za sistem osnovnih pobudjenja uzete su unutrašnje-molekulske vibracije peptidnih grupa (vibroni), jer ovakve ekscitacije imaju energiju od oko 0,25 eV. U račun je uključeno i oscilovanje peptidnih grupa kao celina (fononski podsistem), a takodje i interakcija izmedju unutrašnjih-molekulskih vibracija i vibracija peptidne grupe kao celine.

Na osnovu ovoga molekulski hamiltonijan α -proteinske spirale dat je u obliku:

$$H = H_V + H_P + H_{VP} , \qquad \text{(II 1.1)}$$

gde je:

$$H_V = \sum_{n\alpha} \Delta B^+_{n\alpha} B_{n\alpha} - R \sum_{n\alpha} (B^+_{n\alpha} B_{n+1,\alpha} + B^+_{n+1,\alpha} B_{n\alpha}) +$$
$$+ L \sum_{n\alpha} (B^+_{n\alpha} B_{n,\alpha+1} + B^+_{n,\alpha+1} B_{n\alpha}) , \qquad \alpha = 1, 2, 3 ; \qquad \text{(II 1.2)}$$

hamiltonijan vibronskog podsistema,

$$H_P = \frac{1}{2} \sum_{n\alpha} \left[\frac{1}{M} p^2_{n\alpha} + Q (u_{n\alpha} - u_{n-1,\alpha})^2 \right], \quad \alpha = 1,2,3; \qquad \text{(II 1.3)}$$

hamiltonijan fononskog podsistema,i

$$H_{VP} = \mu_1 \sum_{n\alpha} B^+_{n\alpha} B_{n\alpha} (u_{n+1,\alpha} - u_{n-1,\alpha}) +$$
$$+ \mu_2 \sum_{n\alpha} (B^+_n B_{n+1,\alpha} + B^+_{n+1,\alpha} B_{n\alpha})(u_{n\alpha} - u_{n-1,\alpha}) , \qquad \text{(II 1.4)}$$
$$\alpha = 1, 2, 3;$$

hamiltonijan interakcije vibrona sa fononima.Oznake upotrebljene u ovim formulama su sledeće: $\Delta = \mathcal{E} + D_0$,gde je $\mathcal{E} \sim 0{,}25 eV$,energija potrebna za nastanak vibrona u peptidnoj grupi i D_0 karakteriše interakciju izmedju peptidnih grupa u istom lancu; R karakteriše prenos pobudjenja u lancu peptidnih grupa, L je interakcija izmedju lanaca μ_1 i μ_2 su konstante vibron-fononske interakcije, u su pomeraji peptidnih grupa kao celine, $p = M\dot{u}$ su impulsi peptidnih grupa, Q je konstanta sile u jednom lancu i ista je za sva tri lanca i M je masa peptidne grupe. Operatori $B^+_{n\alpha}$ ($\alpha = 1,2,3$) kreiraju vibronsko pobudjenje na čvoru označenom sa $n\alpha$.

Prema procenama iz rada /62/ R je reda $8,775\cdot 10^{-4}\,eV$, dok je interakcija izmedju lanaca nešto veća i iznosi oko $13,95\cdot 10^{-4}\,eV$.

Solitonska stanja u sistemu sa hamiltonijanom (II 1.1) analiziraju se pomoću talasne funkcije:

$$|D(t)\rangle = \sum_{n\alpha} A_{n\alpha}(t)\, e^{-\hat{S}(t)} B^+_{n\alpha}|0\rangle , \qquad \text{(II 1.5)}$$

gde je:

$$\hat{S}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_{n\alpha}\left[\beta_{n\alpha}(t)\,p_{n\alpha} - \pi_{n\alpha}(t)\,u_{n\alpha}\right] . \qquad \text{(II 1.6)}$$

U formuli (II 1.6) β i π su realne funkcije. Zbog uslova $\langle D(t)|D(t)\rangle = 1$, koeficijenti $A_{n\alpha}$ u (II 1.5) zadovoljavaju uslov normiranja:

$$\sum_{n\alpha} |A_{n\alpha}(t)|^2 = 1 \qquad \text{(II 1.7)}$$

U analizi se koristi Hamiltonov formalizam (paragraf I 2.), a to znači da se traži minimum funkcionala $\langle D(t)|H|D(t)\rangle$, što u kontinualnoj aproksimaciji daje:

$$i\hbar\frac{\partial A_\alpha}{\partial t} = (C+\Delta-2R)A_\alpha - a^2R\frac{\partial^2 A_\alpha}{\partial x^2} +$$

$$+ 2\chi A_\alpha\frac{\partial\beta_\alpha}{\partial x} + L\left(A_{\alpha+1}+A_{\alpha-1}\right), \qquad \text{(II 1 8)}$$

$$\alpha = 1,2,3 ;$$

U ovoj jednačini

$$\chi = a(\mu_1 + \mu_2)\ , \qquad \text{(II 1.9)}$$

gde je a konstanta rešetke, dok je veličina C data izrazom:

$$C = \frac{1}{2a}\sum_{\alpha=1}^{3}\int_{-\infty}^{+\infty}\Big[M\Big(\frac{\partial\beta_\alpha}{\partial t}\Big)^2 + Qa^2\Big(\frac{\partial\beta_\alpha}{\partial x}\Big)^2\Big]dx\ . \qquad \text{(II 1.10)}$$

Kombinovana jednačina kretanja za fononske operatore $p_{n\alpha}$ i $u_{n\alpha}$ usrednjava se po stanjima $|D(t)\rangle$ i u kontinualnoj aproksimaciji glasi:

$$\frac{\partial^2\beta_\alpha}{\partial t^2} - v_0^2\frac{\partial^2\beta_\alpha}{\partial x^2} = \frac{2\chi}{M}\frac{\partial}{\partial x}|A_\alpha|^2\ , \qquad \text{(II 1.11)}$$

gde je:

$$v_0^2 = a^2\frac{Q}{M}\ , \qquad \text{(II 1.12)}$$

brzina zvuka u α-spirali.

Ako u jednačini (II 1.12) uzmemo smenu:

$$\beta_\alpha(x,t) = \beta_\alpha(\xi)\ ,\quad \xi = x - v_K t\ ,\qquad v_K = \frac{2a^2R}{\hbar}K\ , \qquad \text{(II 1.13)}$$

i ako pretpostavimo da $|A_\alpha|^2$ zavisi od združene koordinate ξ ,onda se ova jednačina svodi na:

$$\frac{\partial^2\beta_\alpha}{\partial\xi^2} = -\frac{2\chi}{M(v_0^2 - v_K^2)}\frac{d}{d\xi}|A_\alpha|^2\ , \qquad \text{(II 1.14)}$$

što posle integracije daje:

$$\frac{\partial\beta_\alpha}{\partial\xi} = -\frac{2\chi}{Mv_0^2(1-\nu_K^2)}|A_\alpha|^2\ ,\quad \nu_K = \frac{v_K}{v_0}\ . \qquad \text{(II 1.15)}$$

Ako rezultat (II 1.15) uvrstimo u (II 1.8) dolazimo do sistema nelinearnih Šredingerovih jednačina tipa:

$$i\hbar\frac{\partial A_\alpha}{\partial t} = (C+\Delta-2R)A_\alpha - a^2R\frac{\partial^2 A_\alpha}{\partial x^2} + L(A_{\alpha+1}+A_{\alpha-1}) - \frac{4\chi^2}{Mv_0^2(1-\nu)^2}|A_\alpha|^2A_\alpha$$

$$\alpha = 1,2,3; \qquad \text{(II 1.16)}$$

Uslov normiranja (II 1.7) za koeficijente $A_\alpha(x,t)$ uzet u kontinualnoj aproksimaciji glasi:

$$\sum_\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,|A_\alpha(x,t)|^2 = a . \qquad \text{(II 1.17)}$$

Rešenje sistema jednačina (II 1.16) traži se u obliku:

$$A_\alpha(x,t) = F_\alpha f(\zeta) e^{i\kappa x - i\omega t}; \qquad \overset{*}{f} = f, \quad \overset{*}{F}_\alpha = F_\alpha .$$

(II 1.18)

Zamenom (II 1.18) u uslovu normiranja (II 1.17), dobijamo uslove normiranja za funkciju $f(\zeta)$ i koeficijente F_α :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\zeta\, f^2(\zeta) = a, \qquad \text{(II 1.19)}$$

$$\sum_\alpha F_\alpha^2 = 1 . \qquad \text{(II 1.20)}$$

Posle smene (II 1.18) sistem parcijalnih jednačina (II 1.16) svodi se na sistem običnih jednačina:

$$a^2RF_\alpha\frac{d^2f}{d\zeta^2} = (E_0-E)F_\alpha f + L(F_{\alpha+1}+F_{\alpha-1})f - G|F_\alpha|^2F_\alpha f^3,$$

(II 1.21)

gde je:

$$E_0 = C + \Delta - 2R + a^2\kappa^2 R \ , \tag{II 1.22}$$

i

$$G = \frac{4\chi^2}{M\vartheta_0^2(1-\nu^2)} \ . \tag{II 1.23}$$

Funkcija $f(\zeta)$ uzima se u obliku:

$$f(\zeta) = \sqrt{\frac{a\lambda_\alpha}{2}}\ \frac{1}{ch\,\lambda_\alpha \zeta} \ , \tag{II 1.24}$$

i očigledno je da zadovoljava uslov normiranja (II 1.19). Veličina λ_α je neodredjeni parametar.

Ako se izraz za (II 1.24), za $f(\zeta)$ uvrsti u (II 1.21) dobija se sledeći sistem jednačina:

$$F_{\alpha+1} + Y_\alpha F_\alpha + F_{\alpha-1} = 0 \ ; \quad \alpha = 1,2,3; \quad F_0 = F_4 = 0 \ , \tag{II 1.25}$$

gde je:

$$Y_\alpha = \frac{E_0 - E - a^2 R\lambda_\alpha^2}{L} \ , \tag{II 1.26}$$

i

$$(GF_\alpha^2 - 4a\lambda_\alpha R)F_\alpha = 0 \ . \tag{II 1.27}$$

Iz sistema jednačina (II 1.25) i (II 1.27) mogu se odrediti koeficijenti F_α , λ_α i energija sistema E .Pri tome je osnovni zahtev da λ_α odnosno $f(\zeta)$ budu jednaki za svako $\alpha = 1, 2, 3$.

Sistem jednačina (II 1.25) eksplicitno se može napisati u obliku:

$$\begin{aligned} &Y_1 F_1 + F_2 = 0 \\ &F_1 + Y_2 F_2 + F_3 = 0 \\ &F_2 + Y_3 F_3 = 0 \end{aligned} \qquad \text{(II 1.28)}$$

Uslov netrivijalne rešivosti ovog sistema glasi:

$$Y_1 Y_2 Y_3 - Y_1 - Y_3 = 0 \qquad \text{(II 1.29)}$$

U /3/ se biraju sledeći odnosi Y_α ($\alpha = 1,2,3$) za koje je (II 1.29) zadovoljeno:

$$Y_2 = 2Y_1 \quad , \quad Y_3 = Y_1 \qquad \text{(II 1.30)}$$

$$Y_1 = Y_3 \quad , \quad Y_2 \neq 0 \ . \qquad \text{(II 1.31)}$$

Prvo ćemo analizirati uslov (II 1.30) koji dovodi do tzv.simetričnih solitona /4,5/.Ako se (II 1.30) uvrsti u (II 1.28) dobija se sistem:

$$\begin{aligned} &Y_1 F_1 + F_2 = 0 \\ &F_1 + 2Y_1 F_2 + F_3 = 0 \\ &F_2 + Y_1 F_3 = 0 \end{aligned} \qquad \text{(II 1.32)}$$

odakle je:

$$Y_1^3 - Y_1 = 0 \ , \quad Y_1^{(1)} = 1 \ , \quad Y_1^{(2)} = -1 \ , \quad Y_1^{(3)} = 0 \ , \qquad \text{(II 1.33)}$$

i bira se vrednost: $Y_1 = -1$.

Ako se u (II 1.32) uzme $Y_1 = -1$ dobija se:

$$F_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \ , \quad F_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \ , \quad F_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \ . \qquad \text{(II 1.34)}$$

Ovakav izbor ($Y_1 = -1$) vodi na jedinstvenu vrednost za parametar λ_α koja se odredjuje iz (II 1.27),i ova vrednost iznosi:

$$\lambda_\alpha = \frac{\chi^2}{3aRMv_0^2(1-\nu_K^2)}\ , \qquad \alpha = 1,2,3. \tag{II 1.35}$$

Treba naglasiti da izbor $Y_1 = -1$ vodi na povišenu energiju simetričnih solitona s obzirom na (II 1.26).

Da bismo našli energiju simetričnih solitona potrebno je odrediti i konstantu C ,koja se obzirom na nadjene izraze za $\frac{\partial \beta_\alpha}{\partial \zeta}$ i λ_α može napisati kao:

$$C_{SS} = \frac{2a\chi^2}{3Mv_0^2}\frac{1+\nu_K^2}{(1-\nu_K^2)^2}\sum_{\alpha=1}^{3} F_\alpha^4 \lambda_\alpha = \frac{2\chi^4}{27RM^2v_0^4(1-\nu_K^2)^2}\,\frac{1+\nu_K^2}{1-\nu_K^2}. \tag{II 1.36}$$

Iz uslova $Y_1 = 1$ nalazimo energiju simetričnih solitona ($E_{SS} = E_2$):

$$E_{SS}(K) = E_V(K) + 2L - \frac{\chi^4}{9RMv_0^4(1-\nu_K^2)^2}\left(1 - \frac{2}{3}\,\frac{1+\nu_K^2}{1-\nu_K^2}\right), \tag{II 1.37}$$

gde je:

$$E_V(K) = \Delta - 2R + Ra^2K^2, \tag{II 1.38}$$

energija vibrona.

Ako se veličina ν_K^2 zanemari u odnosu na jedinicu,izraz (II 1.37) se uprošćava i svodi na:

$$E_{SS}(K) = E_V(K) + 2L - \frac{\chi^4}{27RMv_0^4}\ . \tag{II 1.39}$$

Sada se može analizirati uslov (II 1.31)

Ovom uslovu odgovaraju tzv. nesimetrični solitoni.

Ako navedene vrednosti za Y_α uvrstimo u sistem jednačina (II 1.28), on se svodi na:

$$
\begin{aligned}
&F_2 = 0\\
&F_1 + F_3 = 0\\
&F_2 = 0
\end{aligned}
\qquad \text{(II 1.40)}
$$

što znači da ga zadovoljavaju sledeće normirane vrednosti za F :

$$F_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad F_2 = 0, \quad F_3 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \; . \qquad \text{(II 1.41)}$$

Veličina Y_2 koja je ostala neodredjena bira se tako da se dobija snižena solitonska energija, tj. uzima se:

$$Y_2 = 1 \qquad \text{(II 1.42)}$$

Zamenom vrednosti F_1 i F_3 u jednačini (II 1.27) dobija se da je:

$$\lambda_1 = \lambda_3 = \frac{\chi^2}{2aRMv_0^2(1-\nu^2)} \; . \qquad \text{(II 1.43)}$$

Što se tiče odredjivanja parametra λ_2 njegov izbor formalno gledano ostaje proizvoljan jer je za $\alpha = 2$ jednačina (II .27) automatski zadovoljena zbog toga što je $F_2 = 0$. Sledeći ideju jedinstvene vrednosti parametra λ za sve α, uzećemo da je $\lambda_2 = \lambda_1 = \lambda_3$, odnosno za nesimetrične solitone:

$$\lambda_\alpha = \frac{\chi^2}{2aRMv_0^2(1-\nu_K^2)}, \qquad \alpha = 1, 2, 3.$$

(II 1.44)

Na osnovu (II 1.44) i (II.41) nalazi se da konstanta C za nesimetrične solitone iznosi:

$$C_{as} = \frac{\chi^4}{6RM^2 v_0^4 (1-\nu_K^2)^2} \; \frac{1+\nu_K^2}{1-\nu_K^2} \; . \qquad \text{(II 1.45)}$$

Iz uslova $Y_2 = -1$ dobija se energija nesimetričnih solitona:

$$E_{as}(K) = E_V(K) - L - \frac{\chi^4}{4RM^2 v_0^4 (1-\nu_K^2)^2}\left(1 - \frac{2}{3}\,\frac{1+\nu_K^2}{1-\nu_K^2}\right) , \qquad \text{(II 1.46)}$$

ili u aproksimaciji $\nu_K \ll 1$:

$$E_{as}(K) = E_V(K) - L - \frac{\chi^4}{12RM^2 v_0^4} \; . \qquad \text{(II 1.47)}$$

Poredjenjem izraza za energiju simetričnih i nesimetričnih solitona vidi se da su nesimetrični solitoni stabilniji jer imaju nižu energiju.Ova razlika energija iznosi:

$$E_{ss}(K) - E_{as}(K) = 3L + \frac{5}{108}\,\frac{\chi^4}{RM^2 v_0^4} \qquad \text{(II 1.48)}$$

Na osnovu ovoga u radovima /3,4,5/se konstatuje da u procesima migracije energije u α-proteinima dominantnu ulogu igraju nesimetrični solitoni.

Na kraju treba napomenuti da sistem jednačina (II 1.25) i (II 1.27) dopušta još čitav niz rešenja u zavisnosti od izbora veličina Y_α u uslovu netrivijalne rešivosti (II 1.20).U ovakvoj situaciji izvedena analiza i navedeni izbor rezultata za talasnu funkciju i energiju ne bi se mogao prihvatiti kao jedino mogući bez konkretne eksperimentalne potvrde. Sudeći po komentaru iz /2/ ,Davidov sumnja u korektnost rezultata dobijenog za nesimetrične solitone, smatrajući da u analizi nije uzeta u obzir mogućnost da koeficijenti F_α zavise od vremena. Iz analize koja je ovde data izbor $Y_2=1$ (formula (II 1.42)) je savršeno proizvoljan, jer je osnovni sistem jednačina zadovoljen za bilo koju vrednost Y_2 . To drugim rečima znači da se u okviru izloženog prilaza sa stabilnošću nesimetričnih solitona može manipulisati na beskonačno mnogo različitih načina i to očigledno stavlja ceo prilaz i rezultate pod izvesnu sumnju.

II 2. BETEOVSKO RAZDVAJANJE ZONA I SOLITONI

U prethodnom paragrafu analizirani su solitoni u α-proteinima i nadjeno je da postoji dva tipa solitona,pošto se α-proteinske spirale ponašaju u izvesnom smislu kao složena jednodimenziona rešetka.Moglo bi se reći da u α-proteinima dolazi do izražaja efekat davidovljevskog razdvajanja eksitonskih zona /42,63-65/.

Drugi poznati slučaj razdvajanja eksitonskih zona nastaje usled činjenice da se izolovani molekul može pobuditi svetlosnim kvantima na više načina.To znači da svetlost može da pobudi elektron iz osnovnog stanja "0" u pobudjena stanja "1", "2", . . . "W".Svakom ovakvom pobudjenju izolovanog molekula odgovara poseban eksitonski talas i ova pojava više tipova eksitona naziva se beteovsko razdvajanje eksitonskih zona /42,66/.Potpuno je razumljivo da u ovakvoj situaciji,bar u principu,može da se pojavi i W-tipova solitona.Ovde ćemo analizirati ovakvu mogućnost i odrediti karakteristike solitona koji se pojavljuju u kristalu sa multinivoskom šemom pobudjenja izolovanog molekula.

Hamiltonijan "zamrznutog" eksitonskog sistema,koji odgovara W-nivoskoj šemi molekulskih pobudjenja napisaćemo u obliku:

$$H_0 = \sum_{n\alpha} \Delta_\alpha B^+_{n\alpha} B_{n\alpha} + \sum_{nm\alpha} D^{\alpha\alpha}_{nm} B^+_{n\alpha} B_{n\alpha} - \sum_{nm\alpha} R^{\alpha\alpha}_{nm} B^+_{n\alpha} B_{m\alpha} +$$
$$+ \sum_{nm\alpha\alpha'} D^{\alpha\alpha'}_{nm} B^+_{n\alpha} B_{n\alpha'} - \sum_{nm\alpha\alpha'} R^{\alpha\alpha'}_{nm} B^+_{n\alpha} B_{m\alpha'} .$$

(II 2.1)

Operatori $B^+_{n\alpha}$ kreiraju pobudjenje tipa α na molekulu u čvoru n .Ovi operatori su Boze-operatori,a to znači da smo hamiltonijan uzeli u harmonijskoj aproksimaciji /43,67/. Indeksi α i α' uzimaju vrednosti:

$$\alpha, \alpha' \in (1, 2, \ldots w) \qquad \text{(II 2.2)}$$

Veličine Δ_α označavaju energiju pobudjivanja izolovanog molekula,dok su D i R matrični elementi dipol-dipolne interakcije.Kao i uvek u slučaju optičkih pobudjenja,veličine Δ_α su za oko 100 puta veće od veličina R i D .Koeficijenti u hamiltonijanu (II 2.1) zadovoljavaju sledeće relacije simetrije:

$$\overset{*}{\Delta}_\alpha = \Delta_\alpha , \quad \overset{*}{D}{}^{\alpha\alpha}_{nm} = D^{\alpha\alpha}_{nm} , \quad \overset{*}{R}{}^{\alpha\alpha}_{mn} = R^{\alpha\alpha}_{nm} , \quad \overset{*}{D}{}^{\alpha'\alpha}_{nm} = D^{\alpha\alpha'}_{nm} , \quad \overset{*}{R}{}^{\alpha'\alpha}_{mn} = R^{\alpha'\alpha}_{nm} .$$

(II 2.3)

U formuli (II 2.1) razdvojili smo članove dijagonalne po molekulskim pobudjenjima (prva tri člana u (II 2.1)) i nedijagonalne članove.

U analizi beteovskih zona hamiltonijan (II 2.1) se obično piše u obliku:

$$H_0=\sum_{nm\alpha\alpha'}(B_{n1}^{+}B_{n2}^{+}\dots B_{nw}^{+})\begin{pmatrix} M_{nm}^{11} & \dots & M_{nm}^{1w} \\ \vdots & & \vdots \\ M_{nm}^{w1} & \dots & M_{nm}^{ww}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} B_{m1} \\ \vdots \\ B_{mw}\end{pmatrix},$$

(II 2.4)

gde su elementi kvadratne matrice $\hat{M}$ dati sa:

$$M_{nm}^{\alpha\alpha'}=\Delta_\alpha\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{nm}+D_{nm}^{\alpha\alpha'}-R_{nm}^{\alpha\alpha'}, \qquad \text{(II 2.5)}$$

i data kvadratna forma se dijagonalizuje putem neke unitarne matrice $\hat{U}$ koja je istog reda kao i $\hat{M}$ .Ovaj standardni postupak,već kod W=3 vodi na kubne jednačine pri odredjivanju energije,a uopšte,dovodi do jednačine stepena W, za W-tipova molekulskih pobudjenja.Ovo stvara manje-više nepremostive matematičke teškoće i zadržava analizu na opštim jednačinama iz kojih se teško mogu izvesti neki konkretni zaključci.Ovaj strogi metod praktično vredi primenjivati samo u slučaju W=2 kada imamo matricu 2 x 2 i kvadratnu jednačinu za odredjivanje energija.

Naš cilj je da u ovoj analizi izvedemo konkretne i traktabilne rezultate,pa ćemo stoga koristiti približni metod,koji se sastoji u prelasku od hamiltonijana (II 2.1) na ekvivalentni hamiltonijan koji je dijagonalan po indeksima molekulskih pobudjenja α .Prelaz na ekvivalentni hamiltonijan može se realizovatisamo aproksimativno,ali u celoj proceduri postoji "dobar" mali parametar razvoja tipa $\frac{R}{\Delta}$ ili $\frac{D}{\Delta}$ koji je,kao što je već rečeno reda 10^{-2}.

Pošto u solitonskoj teoriji treba uzeti u obzir i hamiltonijan fononskog podsistema, kao i hamiltonijan eksiton-fonon interakcije, mi ćemo tražiti ekvivalentni hamiltonijan za sistem koji sadrži eksitone, fonone i njihovu interakciju.

Ako čvorovi rešetke osciluju, onda:

$$n \to n + u_n\,, \quad m \to m + u_m\,, \quad H_0 \to H\,. \tag{II 2.6}$$

U aproksimaciji linearnoj po molekulskim pomerajima u možemo pisati:

$$D_{nm}^{\alpha\alpha} \to \hat{D}_{nm}^{\alpha\alpha} = D_{nm}^{\alpha\alpha} + \frac{i}{N}\sum_{k} k D_{k}^{\alpha\alpha}(u_n - u_m)\, e^{ika(n-m)}\,,$$

$$R_{nm}^{\alpha\alpha} \to \hat{R}_{nm}^{\alpha\alpha} = R_{nm}^{\alpha\alpha} + \frac{i}{N}\sum_{k} k R_{k}^{\alpha\alpha}(u_n - u_m)\, e^{ika(n-m)}\,,$$

$$D_{nm}^{\alpha\alpha'} \to \hat{D}_{nm}^{\alpha\alpha'} = D_{nm}^{\alpha\alpha'} + \frac{i}{N}\sum_{k} k D_{k}^{\alpha\alpha'}(u_n - u_m)\, e^{ika(n-m)}\,,$$

$$R_{nm}^{\alpha\alpha'} \to \hat{R}_{nm}^{\alpha\alpha'} = R_{nm}^{\alpha\alpha'} + \frac{i}{N}\sum_{k} k R_{k}^{\alpha\alpha'}(u_n - u_m)\, e^{ika(n-m)}\,, \tag{II 2.7}$$

tako da H koji sadrži eksitone i njihovu interakciju sa fononima postaje:

$$H = \sum_{n\alpha} \Delta_\alpha B_{n\alpha}^{+} B_{n\alpha} + \sum_{nm\alpha} \hat{D}_{nm}^{\alpha\alpha} B_{n\alpha}^{+} B_{n\alpha} - \sum_{nm\alpha} \hat{R}_{nm}^{\alpha\alpha} B_{n\alpha}^{+} B_{m\alpha} +$$

$$+ \sum_{nm\alpha\alpha'} \hat{D}_{nm}^{\alpha\alpha'} B_{n\alpha}^{+} B_{n\alpha'} - \sum_{nm\alpha\alpha'} \hat{R}_{nm}^{\alpha\alpha'} B_{n\alpha}^{+} B_{m\alpha'}\,, \tag{II 2.8}$$

gde operatorski koeficijenti zadovoljavaju uslove simetrije:

$$\overset{*}{\Delta}_{\alpha} = \Delta_{\alpha}\,,\quad \left(\hat{D}^{\alpha\alpha}_{nm}\right)^{+} = \hat{D}^{\alpha\alpha}_{nm}\,,\quad \left(\hat{R}^{\alpha\alpha}_{nm}\right)^{+} = \hat{R}^{\alpha\alpha}_{nm}\,,\quad \left(\hat{D}^{\alpha'\alpha}_{nm}\right)^{+} = \hat{D}^{\alpha\alpha'}_{nm}\,,$$

$$\left(\hat{R}^{\alpha\alpha'}_{mn}\right)^{+} = \hat{R}^{\alpha\alpha'}_{nm}\,. \qquad \text{(II 2.9)}$$

Na osnovu uslova simetrije (II 2.9) slede i uslovi simetrije za Furije-likove D_K i R_K :

$$\overset{*}{D}{}^{\alpha\alpha}_{-K} = D^{\alpha\alpha}_{K}\,,\quad \overset{*}{R}{}^{\alpha\alpha}_{K} = R^{\alpha\alpha}_{K}\,,\quad \overset{*}{D}{}^{\alpha\alpha'}_{-K} = D^{\alpha'\alpha}_{K}\,,\quad \overset{*}{R}{}^{\alpha'\alpha}_{K} = R^{\alpha\alpha'}_{K}\,. \qquad \text{(II 2.10)}$$

Kompletan hamiltonijan sistema koji sadrži eksitone,fonone i njihovu interakciju možemo napisati u obliku:

$$H_{tot} = H + H_P\;, \qquad \text{(II 2.11)}$$

gde je:

$$H_P = \frac{1}{2}\sum_n\left[\frac{p_n^2}{M} + Q\,(u_n - u_{n-1})^2\right]. \qquad \text{(II 2.12)}$$

U formuli (II 2.12) M je masa molekula, Q konstanta sile i $p_n = M\dot{u}_n$ molekulski impuls.

Od hamiltonijana (II 2.1) preći ćemo na ekvivalentni hamiltonijan putem unitarne transformacije:

$$H_{eq} = e^{-i\hat{\lambda}}\hat{H}_{tot}\,e^{i\hat{\lambda}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i)^n}{n!}\left[\hat{\lambda},\left[\hat{\lambda},\ldots\left[\hat{\lambda},\hat{H}_{tot}\right]\ldots\right]\right. \approx$$

$$\approx \hat{H}_{tot} - i\left[\hat{\lambda},\hat{H}_{tot}\right] - \frac{1}{2}\left[\hat{\lambda},\left[\hat{\lambda},\hat{H}_{tot}\right]\right]\,, \qquad \text{(II 2.13)}$$

gde je ermitski operator $\hat{\lambda}$ dat izrazom:

$$\hat{\lambda}=\sum_{fg\mu\nu}\left[\hat{X}_{fg}^{\mu\nu}B_{f\mu}^{+}B_{f\nu}+\hat{Y}_{fg}^{\mu\nu}B_{f\mu}^{+}B_{g\nu}\right],$$

$$X^{\mu\mu}=Y^{\mu\mu}=0,\quad \mu,\nu\in(1,2,\dots w), \qquad \text{(II 2.14)}$$

pri čemu operatori $\hat{X}$ i $\hat{Y}$ zadovoljavaju relacije simetrije:

$$(\hat{X}_{fg}^{\mu\nu})^{+}=\hat{X}_{fg}^{\mu\nu},\qquad (\hat{Y}_{gf}^{\nu\mu})^{+}=\hat{Y}_{fg}^{\mu\nu}. \qquad \text{(II 2.15)}$$

Operatore $\hat{X}$ i $\hat{Y}$ odredjujemo tako da iz ekvivalentnog hamiltonijana isčeznu nedijagonalni delovi po indeksima molekulskih pobudjenja.

U aproksimaciji linearnoj po malom parametru $\eta=\frac{\phi}{\Delta_{\alpha}-\Delta_{\alpha'}}$; $\alpha'\neq\alpha$,gde ϕ predstavlja simboličku oznaku za D, R i fononsku energiju operatori $\hat{X}$ i $\hat{Y}$ imaju oblik:

$$\hat{X}_{fg}^{\mu\nu}=i\,\frac{\hat{D}_{fg}^{\mu\nu}}{\Delta_{\mu}-\Delta_{\nu}},\qquad \hat{Y}_{fg}^{\mu\nu}=-i\,\frac{\hat{R}_{fg}^{\mu\nu}}{\Delta_{\mu}-\Delta_{\nu}},$$

$$\mu\neq\nu \qquad \text{(II 2.16)}$$

dok se ekvivalentni hamiltonijan uzet u aproksimaciji najbližih suseda može napisati kao:

$$H_{eq}=\sum_{n\alpha}\tilde{\Delta}_{\alpha}B_{n\alpha}^{+}B_{n\alpha}-\sum_{n\alpha}\tilde{R}_{\alpha}(B_{n\alpha}^{+}B_{n+1,\alpha}+B_{n\alpha}^{+}B_{n-1,\alpha})+$$

$$+\sum_{n\alpha}\tilde{J}_{\alpha R}\left[B_{n\alpha}^{+}B_{n+1,\alpha}(u_{n+1}-u_{n})+B_{n\alpha}^{+}B_{n-1,\alpha}(u_{n}-u_{n-1})\right]-$$

$$-\sum_{n\alpha} \tilde{J}_{\alpha D} B^+_{n\alpha} B_{n\alpha} (u_{n+1} - u_{n-1}) +$$

$$+ \sum_{n\alpha} (\overset{*}{g}{}^{\alpha\alpha}_{RD} B^+_{n\alpha} B_{n-1,\alpha} + g^{\alpha\alpha}_{RD} B^+_{n-1} B_{n\alpha})(u_{n+1} - u_n) +$$

$$+ \sum_{n\alpha} (\overset{*}{g}{}^{\alpha\alpha}_{RD} B^+_{n\alpha} B_{n+1,\alpha} + g^{\alpha\alpha}_{RD} B^+_{n+1,\alpha} B_{n\alpha})(u_n - u_{n-1}) +$$

$$+ \sum_{n} \left[\frac{1}{2M} p_n^2 + \frac{Q}{2} (u_n - u_{n-1})^2 \right] , \qquad \text{(II 2.17)}$$

gde je:

$$\tilde{\Delta}_\alpha = \Delta_\alpha + 2D^{\alpha\alpha} + 4\sum_{\alpha'} \frac{|D^{\alpha\alpha'}|^2}{\Delta_\alpha - \Delta_{\alpha'}} ,$$

$$\tilde{R}_\alpha = R^{\alpha\alpha} + 4\sum_{\alpha'} \frac{\mathrm{Re}(R^{\alpha\alpha'} D^{\alpha\alpha'})}{\Delta_\alpha - \Delta_{\alpha'}} ,$$

$$\tilde{J}_{\alpha R} = J_R^{\alpha\alpha} + 2\sum_{\alpha'} \frac{\mathrm{Re}(R^{\alpha\alpha'} J_D^{\alpha'\alpha} + 2 J_R^{\alpha\alpha'} D^{\alpha\alpha'})}{\Delta_\alpha - \Delta_{\alpha'}} ,$$

$$\tilde{J}_{\alpha D} = J_D^{\alpha\alpha} + 4\sum_{\alpha'} \frac{\mathrm{Re}(D^{\alpha\alpha'} J_D^{\alpha\alpha'})}{\Delta_\alpha - \Delta_{\alpha'}} ,$$

$$\tilde{g}_{RD} = \sum_{\alpha'} \frac{R^{\alpha\alpha'} J_D^{\alpha\alpha'}}{\Delta_\alpha - \Delta_{\alpha'}} , \qquad \text{(II 2.18)}$$

$$J_R^{\alpha\alpha'} = N^{-1} \sum_{K} K R_K^{\alpha\alpha'} \sin aK ,$$

$$J_D^{\alpha\alpha'} = N^{-1} \sum_{K} K D_K^{\alpha\alpha'} \sin aK .$$

Kao što se vidi ekvivalentni hamiltonijan (II 2.17) predstavlja sumu od W-nezavisnih hamiltonijana po indeksima molekulskih pobudjenja α ,i ovo olakšava dalju analizu solitonskog problema.Može se ispitivati samo jedan tip solitona (sa indeksom μ ,recimo) i rezultati važe za svako $\mu = 1, 2, \dots W$ .Ovde naravno treba postaviti jedno ograničenje.Kao što je poznato od ranije solitoni mogu da nastanu samo u slučaju kada eksitoni imaju pozitivnu efektivnu masu.S obzirom na formu hamiltonijana (II 2.17),pomenuti uslov se svodi na $\tilde{R}_{\mu} > 0$ .Drugim rečima u posmatranom sustemu može da nastane onoliki broj različitih talasnih paketa,koliko ima članova u (II 2.17) sa $\tilde{R}_{\mu} > 0$.

Mi ćemo pretpostaviti da je $\tilde{R}_{\mu} > 0$ za neko fiksirano μ i standardnim putem ispitati osobine solitona tipa μ .

Ako za talasnu funkciju:

$$|\mu\rangle = \sum_f A_f^{\mu}(t) B_{f\mu} \;; \quad \langle \mu | \mu \rangle = 1 \,, \quad \sum_f |A_f^{\mu}(t)|^2 = 1 \,, \qquad \text{(II 2.19)}$$

napišemo Šredingerovu jednačinu koja se usrednji po koherentnim fononskim stanjima $|C_p\rangle$ i rezultat prevede u kontinuum,dolazi se do jednačine:

$$i\hbar \frac{\partial A^{\mu}}{\partial t} = (C_{\mu} + \tilde{\Delta}_{\mu} - 2\tilde{R}_{\mu}) A^{\mu} - a^2 \tilde{R}_{\mu} \frac{\partial^2 A^{\mu}}{\partial x^2} + 2\chi_{\mu} A^{\mu} \frac{\partial \beta}{\partial x} \,,$$

$$\chi_{\mu} = a(\tilde{J}_{\mu R} - \tilde{J}_{\mu D} + g_{RD}^{\mu\mu} + \overset{*}{g}{}_{RD}^{\mu\mu}) \,, \qquad \text{(II 2.20)}$$

gde je:

$$C_{\mu} = \frac{1}{2a} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[M \left(\frac{\partial \beta}{\partial t} \right)^2 + Q a^2 \left(\frac{\partial \beta}{\partial x} \right)^2 \right] . \qquad \text{(II 2.21)}$$

Kombinovana jednačina za fononske operatore,usrednjena po stanjima $|\mu\rangle|C_p\rangle$,u kontinuumu glasi:

$$\frac{\partial^2 \beta}{\partial t^2} = v_0^2 \frac{\partial^2 \beta}{\partial x^2} + \frac{2\chi_\mu}{M} \frac{\partial}{\partial x}(\overset{*}{A}{}^\mu A^\mu) , \quad v_0^2 = a^2 \frac{Q}{M} .$$

(II 2.22)

Uslov normiranja (II 2.19) ,zapisan u kontinuumu ima oblik:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \, |A^\mu(x,t)|^2 = a . \qquad \text{(II 2.23)}$$

Procedura rešavanja sistema jednačina (II 2.20) i (II 2.22) već je više puta ponavljna,pa se na njoj nećemo zadržavati.Navešćemo samo krajnje rezultate.

Energija solitona tipa μ data je izrazom :

$$E_\mu(\kappa) = \tilde{\Delta}_\mu - 2\tilde{R}_\mu + a^2\kappa^2\tilde{R}_\mu - \frac{\chi_\mu^4}{\tilde{R}_\mu M^2 v_0^4 (1-\nu_{\mu\kappa}^2)^2} \left(1 + \frac{2}{3}\,\frac{1+\nu_{\mu\kappa}^2}{1-\nu_{\mu\kappa}^2}\right)$$

(II 2.24)

gde je:

$$\nu_{\mu\kappa} = \frac{v_{\mu\kappa}}{v_0} , \quad v_{\mu\kappa} = \frac{2a^2\tilde{R}_\mu}{\hbar}\,\kappa . \qquad \text{(II 2.25)}$$

Normirana amplituda ima oblik:

$$A^\mu(x,t) = \frac{a\,\Omega_\mu^{1/2}}{2} \, \frac{e^{i\kappa x - i\frac{E_\mu(\kappa)}{\hbar}t}}{\mathrm{ch}\,\frac{a\Omega_\mu}{2}\,\xi} , \qquad \text{(II 2.26)}$$

gde je:

$$\Omega_\mu \equiv \Omega_\mu(\kappa) = \frac{2\chi_\mu^2}{a^2\tilde{R}_\mu M v_0^2 (1-\nu_{\mu\kappa}^2)} . \qquad \text{(II 2.27)}$$

Interesantno je napomenuti da svakom tipu solitona μ odgovara svoj tip deformacije rešetke dat izrazom:

$$\frac{d\beta_\mu}{d\xi} = -\frac{1}{2}\,\frac{a^2\Omega_\mu \chi_\mu}{M v_0^2(1-\nu_{\mu K}^2)}\,\frac{1}{ch^2\frac{a\Omega_\mu}{2}\xi}\,, \qquad \text{(II 2.28)}$$

gde je:

$$\xi = x - v_{\mu K} t \qquad \text{(II 2.29)}$$

Ukoliko su $\tilde{R}_\mu > 0$ za svako $\mu = 1, 2, \dots W$ onda u sistemu imamo W-tipova solitona sa navedenim oso - binama.Ukoliko je r koeficijenata ($r < W$) $\tilde{R}_\mu < 0$, onda u sistemu imamo $(W-r)$ solitona.

U vezi sa ovim interesantno je napomenuti da formalno i pri $\tilde{R}_\mu < 0$ mogu da se obrazuju talasni paketi, ali samo za $v_{\mu K} > v_0$.Iz računa koji su ovde izvedeni lako se može naći da je energija ovih talasnih paketa:

$$E'_\mu(K) = \tilde{\Delta}_\mu + 2|\tilde{R}_\mu| - a^2K^2|\tilde{R}_\mu| + \frac{\chi'^4}{|\tilde{R}_\mu| M^2 v_0^4 (\nu'^2_{\mu K} - 1)^2}\left(1 + \frac{2}{3}\,\frac{\nu'^2_{\mu K} + 1}{\nu'^2_{\mu K} - 1}\right)$$

$$\nu'^2_{\mu K} = \frac{v^2_{\mu K}}{v_0^2}\,, \qquad \chi'_\mu = -a\left(|\tilde{J}_{R\mu}| + \tilde{J}_{D\mu} + 2|Re\, g^{\mu\mu}_{RD}|\right). \qquad \text{(II 2.30)}$$

Kao što se vidi ovi talasni paketi,koje ćemo uslovno nazvati antisolitonima,imaju višu energiju od energije odgovarajućih eksitona,jer član koji dolazi usled eksiton-fonon interakcije ulazi u energiju sa pozitivnim znakom.Zbog ove činjenice antisoliton bi,za razliku od solitona bio veoma nestabilno pobudjenje,tako da je pitanje njegove egzistencije diskutabilno.

II 3. SOLITONI U FEROMAGNETICIMA

Solitoni u feromagneticima imaju niz specifičnih karakteristika u odnosu na solitone u molekulskim kristalima.Zbog ovoga je i teorijski prilaz pri ispitivanju solitonskih stanja bitno različit od prilaza koje smo do sada koristili analizirajući Davidovljeve solitone.

Ne zadržavajući se na svim razlikama dva pomenuta sistema ograničićemo se samo jednom koja je bitna:u feromagnetiku talasni paketi mogu da nastanu i bez prisustva fonona zahvaljujući medjuspinskim interakcijama i pojavi anizotropije /68/.Ovde će biti razmatrana aksijalna i planarna anizotropija.Razume se da solitoni mogu da nastanu i u prisustvu polja mehaničkih oscilacija ali,kao što ćemo kasnije videti,oni nisu dovoljno stabilni /69/.

Solitoni u magnetnim materijalima analizirani su u nizu radova /70-85/ i ovde ćemo se držati ideja iznesenih u tim radovima,sa ciljem da neke nedovoljno razjašnjene probleme bolje osvetlimo i eliminišemo izvesne nekorektnosti ili nedovoljno stroge aproksimacije.Izlaganje će biti podeljeno na dva dela.U prvom delu biće analizirani solitoni kiji nastaju kao rezultat spin-spin interakcija, i efekata anizotropije,dok će u drugom delu biti ispitane posledice prisustva fonona.

Hamiltonijan jednodimenzionog feromagnetika sa aksijalnom ili planarnom anizotropijom napisaćemo u obliku:

$$H=-\frac{1}{2}J\sum_{n,\delta}\vec{S}_n\vec{S}_{n+\delta}+A\sum_n(S_n^z)^2-\mu H_0\sum_n S_n^z\,. \quad \text{(II 3.1)}$$

U ovoj formuli $\vec{S}$ su spinski operatori, $J>0$ su interakcije izmene za najbliže susede, μH je energija koja dolazi usled prisustva spoljašnjeg magnetnog polja jačine H_0 i δ povezuje najbliže susede.Preko člana proporcionalnog A uključeni su efekti anizotropije,pri čemu je za aksijalnu anizotropiju $A<0$,dok je za planarnu $A>0$.

Sledeći ideje iz /75/ u hamiltonijanu (II 3.1) ćemo preći na sferne koordinate:

$$S^x=S\sin\theta\cos\phi\,,\quad S^y=S\sin\theta\sin\phi\,,\quad S^z=S\cos\theta=S\mathcal{U}(x)\,,$$

posle čega u kontinualnoj aproksimaciji dobijamo:

$$H=\frac{1}{a}\int_{-\infty}^{+\infty}\Big\{\frac{JS^2a^2}{2}\Big[\frac{1}{1-u^2}\Big(\frac{\partial u}{\partial x}\Big)^2+(1-u^2)\Big(\frac{\partial\phi}{\partial x}\Big)\Big]+$$

$$+AS^2(u^2-1)+\mu H_0S(1-u)\Big\}. \quad \text{(II 3.2)}$$

Ukupni moment sistema u ovom koordinatnom sisremu,dat je sa:

$$P=\frac{S}{a}\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,(1-u)\frac{\partial\phi}{\partial x}\,, \quad \text{(II 3.3)}$$

dok ukupna magnetizacija ima oblik:

$$M_z = \frac{S}{a}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,(1-u)\,. \qquad \text{(II 3.4)}$$

U svim ovim izrazima a je konstanta rešetke.

Jednačine kretanja za varijable ϕ i $S^z = S\,u(x)$, dobijene su iz uslova minimuma gustine hamiltonijana (II 3.1) i glase:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}\sin\theta = -\mu H_0 \sin\theta + 2AS\cos\theta\sin\theta + {} \\ + JSa^2\left[\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} - \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2 \sin\theta\cos\theta\right], \qquad \text{(II 3.5)}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\cos\theta) = JSa^2\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\sin^2\theta\right). \qquad \text{(II 3.6)}$$

Pretpostavićemo da su rešenja navedenog sistema jednačina oblika:

$$u(x,t) = u(x - vt)\;, \qquad \text{(II 3.7)}$$

$$\phi(x,t) = \omega t + \phi(x - vt)\;, \qquad \text{(II 3.8)}$$

i da zadovoljavaju granične uslove:

$$u(\pm\infty) = 1\;, \qquad \frac{\partial u}{\partial x}(\pm\infty) = 0\;. \qquad \text{(II 3.9)}$$

Uz pomenute pretpostavke jednačina (II 3.6) se svodi na:

$$\frac{\partial\phi}{\partial x} = \frac{V}{1+\cos\theta}\;, \qquad V = \frac{v}{JSa^2}\;. \qquad \text{(II 3.10)}$$

U jednačini (II 3.5) se uzima $\theta=2\beta$ i ona postaje:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}\sin\beta\right)^2=\Gamma\sin^2\beta\left[\cos^2\beta-\frac{D}{\Gamma}\cos^4\beta-\frac{V^2}{4\Gamma}\right],$$

$$\Gamma=\frac{\omega+\mu H_0}{JSa^2}\ ,\quad D=\frac{2A}{Ja^2}\ . \qquad \text{(II 3.11)}$$

Sada možemo analizirati slučaj aksijalne anizotropije kada je $D<0$. Uvodeći oznake $D=-\gamma$; $\gamma=\left|\frac{2A}{Ja^2}\right|>0$, rešenje (II 3.11) možemo pisati u obliku:

$$\cos\theta=1-2\sin^2\beta=$$

$$=1-\frac{2\sin^2\beta_0}{1+\frac{\sin^2\beta_0}{\alpha}\left(1+\frac{v^2}{v_0^2}\right)^{1/2}\sinh^2(\alpha\Gamma)^{1/2}(x-vt)}\ , \qquad \text{(II 3.12)}$$

gde se amplituda β_0 odredjuje iz uslova $\frac{\partial}{\partial x}(\sin\beta)=0$, što daje:

$$\cos^2\beta_0+\frac{\gamma}{\Gamma}\cos^4\beta_0=\frac{V^2}{4\Gamma}\ , \qquad \text{(II 3.13)}$$

$$\alpha=1+\frac{\gamma}{\Gamma}-\frac{V}{4\Gamma}\ ,\quad v_0^2=\frac{\Gamma^2}{\gamma}\ . \qquad \text{(II 3.14)}$$

Dobijeni rezultati omogućuju nam da odredimo energiju,momenat i magnetizaciju.Izrazi za pomenute veličine su sledeći:

$$E=\mu H_0M+2JS^2a\,(4\Gamma+4\gamma-v^2)^{1/2}, \qquad \text{(II 3.15)}$$

$$P = \frac{2S}{a}\,\frac{\dfrac{\vartheta^2}{2\Gamma} - 1}{\left(1 + \dfrac{\vartheta^2}{\vartheta_0^2}\right)^{1/2}}\,, \tag{II 3.16}$$

$$M_z = \frac{2S}{2\gamma^{1/2}}\,\mathrm{arch}\,\frac{\dfrac{2\gamma}{\Gamma} + 1}{\left(1 + \dfrac{\vartheta^2}{\vartheta_0^2}\right)^{1/2}}\,. \tag{II 3.17}$$

Interesantno je napomenuti da se amplituda, brzina i energija solitona na osnovu dobijenih izraza mogu izraziti preko momenta P i magnetizacije M_z. Posle relativno prostih algebarskih operacija dolazi se do sledećih rezultata:

$$\sin^2\beta_0 = \frac{\mathrm{ch}\left(\dfrac{M_z a \gamma^{1/2}}{2S}\right) - \cos\dfrac{Pa}{2S}}{\mathrm{ch}\,\dfrac{M_z \gamma^{1/2} a}{2S} + 1}\,, \tag{II 3.18}$$

$$\vartheta^2 = \frac{4\gamma}{\mathrm{sh}^2\,\dfrac{M_z a \gamma^{1/2}}{2S}}\,\sin^2\frac{Pa}{2S}\,, \tag{II 3.19}$$

$$E = 4JS^2 a \gamma^{1/2}\,\frac{\mathrm{ch}\,\dfrac{M_z a \gamma^{1/2}}{2S} - \cos\dfrac{Pa}{2S}}{\mathrm{sh}\,\dfrac{M_z a \gamma^{1/2}}{2S}}\,. \tag{II 3.20}$$

Magnetizacija sistema može se kvantovati na osnovu poluklasične Bor-Zomerfeldove teorije:

$$M_z = m\hbar \ , \quad m = 0, 1, 2, \ldots \tag{II 3.21}$$

dok se za lanac dužine L ,korišćenjem de Broljove talasne dužine,moment kvantuje na sledeći način:

$$P_n = \frac{2\pi\hbar}{L} n \ , \quad n = 0, \pm 1, \pm 2 \ \ldots \tag{II 3.22}$$

Zamenom ovih izraza u (II 3.15) dolazi se do izraza za solitonsku energiju:

$$E_m(P) = \mu H_0 m\hbar + 4JS^2 a \gamma^{1/2} \frac{ch \frac{\gamma^{1/2} a m\hbar}{2S} - \cos \frac{P_n a}{2S}}{sh \frac{\gamma^{1/2} a}{2S} m\hbar} \ . \tag{II 3.23}$$

kojim su obuhvaćeni translacioni stepen slobode i stepen slobode unutrašnjih rotacija.

U slučaju planarne anizotropije je $D>0$. Ako se uvedu pretpostavke : $\omega=0$ i na osnovu toga $\mu H_0 \gg 2AS$, rešenje jednačine (II 3.11) se može napisati u obliku:

$$\cos\Theta = 1 - \frac{2\sin^2\beta_0}{1 + \left(1 - \frac{v^2}{v_0^2}\right) \frac{\sin^2\beta_0}{b} \sinh^2 (b\Gamma)^{1/2} (x - vt)} \ , \tag{II 3.24}$$

$$v_0 = \frac{\Gamma^2}{D} \ , \qquad b = 1 - \frac{D}{\Gamma} - \frac{V^2}{4\Gamma} \ .$$

Ponavljajući analognu proceduru kao i u slučaju aksijalne anizotropije,nalazimo da kvantovana energija solitona u slučaju planarne anizotropije iznosi:

$$E = \mu H_0 m\hbar + 4JS^2 a D^{1/2} \frac{\cos\frac{D^{1/2} a m\hbar}{2S} - \cos\frac{P_n a}{2S}}{\sin\frac{D^{1/2} a m\hbar}{2S}} . \qquad \text{(II 3.25)}$$

U rezimeu ovih analiza treba istaći sledeće:

a) Usled anizotropije u spektru solitona postoji prag energije čak i kada je spoljašnje magnetno polje H_0 ravno nuli.

b) Solitonska energija za $M_z = m\hbar$ može se interpretirati kao energija vezanog stanja magnona /84/.

c) U graničnom slučaju $|A| \to 0$ svi dobijeni rezultati prelaze u rezultate rada /75/ koji se odnosi na izotropni feromagnetik.

Sada možemo ispitati ulogu fonona u obrazovanju solitona u jednodimenzionom Hajzenbergovom feromagnetiku. Hamiltonijan sistema interagujućih spinskih talasa i fonona može se napisati u obliku:

$$H = \sum_n \frac{P_n^2}{2m} + \frac{1}{2} m v_0^2 \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2 - J \sum_n S_n S_{n+1} -$$

$$- g \sum_n (u_{n+1} - u_n) S_n S_{n+1} , \qquad \text{(II 3.26)}$$

gde su u_n pomeraji magnetnih jona iz ravnotežnog položaja, v_0 -brzina zvuka, $g > 0$ -konstanta interakcije izmedju spinskih talasa i fonona i m -masa po jedinici dužine lanca.

U kontinualnoj aproksimaciji hamiltonijan (II 3.26) se može napisati u obliku:

$$H = \int \mathcal{H}\, dx \, , \tag{II 3.27}$$

gde je gustina $\mathcal{H}$ data izrazom:

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \frac{g}{2}\,\frac{\partial u}{\partial x}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}\, m v_0^2 \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 . \tag{II 3.28}$$

Korišćenjem kombinovanih jednačina za operatore u i p ,ove varijable se mogu eliminisati iz (II 3.28).Posle prostih proračuna, uz primenu graničnih uslova:

$$S^z(\pm\infty) = S \, , \quad \left(\frac{\partial S^z}{\partial x}\right)\Big|_{\pm\infty} = 0 \, , \tag{II 3.29}$$

i pretpostavke $u(x,t) = u(x - vt)$,dobija se:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = -\,\frac{g}{2m\,(v_0^2 - v^2)}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 . \tag{II 3.30}$$

Zamenom (II 3.30) u (II 3.28) nalazi se izraz za efektivnu gustinu hamiltonijana:

$$\mathcal{H}_{eff} = \frac{J}{2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 - \frac{g^2 (v_0^2 - 3v^2)}{8m\,(v_0^2 - v^2)^2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^4 , \tag{II 3.31}$$

koji se u slučaju malih brzina ($v \ll v_0$) svodi na:

$$\mathcal{H}_{eff} = \frac{J}{2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 - \frac{g^2}{8m\,v_0^2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^4 \tag{II 3.32}$$

Posle uvodjenja sfernih koordinata:

$$S^z = S\cos\theta\,,\quad S^x = S\sin\theta\cos\phi\,,\quad S^y = S\sin\theta\sin\phi \tag{II 3.33}$$

u formolu (II 3.31) mogu se formirati Hamiltonove jednačine koje glase:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\cos\theta) = JS\frac{\partial}{\partial x}\left(A\frac{\partial\phi}{\partial x}\sin^2\theta\right)\cdot \tag{II 3.34}$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}\sin\theta = JS\frac{\partial A}{\partial x}\frac{\partial\theta}{\partial x} + JSA\left[\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} - \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2\sin\theta\cos\theta\right] \tag{II 3.35}$$

gde je:

$$A = 1 - \frac{\nu}{S}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2\,,\quad \nu = \frac{g^2S^2}{2m\upsilon_0^2}\,. \tag{II 3.36}$$

Rešenje sistema jednačina (II 3.34) i (II 3.35) tražićemo u obliku:

$$\theta = \Theta(\zeta)\,,\quad \phi = \Omega t + \bar{\phi}(\zeta)\,,\quad \zeta = x - \upsilon t\,. \tag{II 3.37}$$

Posle ove smene i primene napred pomenutih graničnih uslova, iz jednačine (II 3.34), dobijamo:

$$\frac{d\phi}{d\zeta} = \frac{d\bar{\phi}}{d\zeta} = \frac{V}{A(1+\cos\theta)}\,,\quad V = \frac{\upsilon}{2S}\,, \tag{II 3.38}$$

dok se jednačina (II 3.35) svodi na:

$$\frac{\Omega}{JS}\sin\Theta - \frac{dA}{d\xi}\frac{d\theta}{d\xi} - A\frac{d^2\theta}{d\xi^2} - \frac{V^2\sin\theta}{A(1+\cos\theta)^2} = 0$$

(II 3.39)

Poslednja jednačina se ne može rešiti analitički,tako da pitanje egzistencije solitonskih rešenja ostaje otvoreno.Ovde ćemo se ograničiti slučajem statičkih solitona (V=0).Ako je $V=0$,onda je $\frac{\partial\phi}{\partial x}=0$,pa jednačina (II 3.39) postaje:

$$\frac{3}{4}\nu\left(\frac{\partial\theta}{\partial x}\right)^4 - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\theta}{\partial x}\right)^2 + \Gamma(1-\cos\theta)=0\ , \quad \Gamma=\frac{\Omega}{JS}\ . \qquad \text{(II 3.40)}$$

Ova jednačina, pri inicijalnim uslovima:

$$\Theta_0=\Theta(x_0)=\pi\ , \quad \frac{\partial}{\partial x}(\cos\theta)\Big|_{x=x_0}=0 \qquad \text{(II 3.41)}$$

ima solitonsko rešenje i ono se može napisati u obliku:

$$\frac{x-x_0}{2^{1/2}} = \pm\int_{\pi}^{0}\frac{f^{1/2}\,d\theta}{\left\{b-\left[b^2-4\Omega f(1-\cos\theta)\right]^{1/2}\right\}^{1/2}}\ , \qquad \text{(II 3.42)}$$

gde je:

$$f=\frac{3}{4}\nu JS\ , \quad b=\frac{JS}{2}\ . \qquad \text{(II 3.43)}$$

Rešenje je analogno rešenju koje je metodom funkcionalne integracije dobijeno u radu /74/,ali postoji jedna bitna razlika: ovde nadjeno rešenje ukazuje na solitonsku lokalizaciju za razliku od rešenja iz /74/ u kome je jače izražena tendencija širenja.

Jednačina (II 3.40) može se rešavati samo numerički. Analitičku procenu rešenja izvršićemo uz pretpostavku da je spin-fonon interakcija, karakterisana konstantom ν, slaba. Tada relativno prost račun daje:

$$\cos\theta = 1 - \frac{2}{ch^2\Gamma^{1/2}(x-x_0) + 6\nu\Gamma sh^2\Gamma^{1/2}(x-x_0)} . \qquad \text{(II 3.44)}$$

U slučaju da spin-fonon interakcija ne postoji, dobijeni rezultat se poklapa sa rezultatom iz /75/ za izotropni Hajzenbergov model.

Da bismo ispitali šta se dogadja u drugom graničnom slučaju kada spin-spin interakcija postaje zanemarljiva, u izrazu (II 3.28) ćemo spinske operatore zameniti Boze-operatorima koristeći reprezentaciju Holštajn-Primakofa /86/. Tada izraz za gustinu hamiltonijana postaje:

$$\mathcal{H} = JS\left|\frac{\partial\alpha}{\partial x}\right|^2 + gS\frac{\partial u}{\partial x}\left|\frac{\partial\alpha}{\partial x}\right|^2 + \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}mv_0^2\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2,$$

(II 3.45)

gde je uvedena Glauberova reprezentacija koherentnih spinskih stanja (n i m su indeksi čvorova):

$$|\alpha\rangle \equiv |\{\alpha(m)\}| = \prod_m |\alpha_m\rangle , \qquad \hat{B}|\alpha_n\rangle = \alpha_n|\alpha_n\rangle ,$$

$$\langle\alpha|S_n^z|\alpha\rangle = S - |\alpha_n|^2, \qquad \text{(II 3 46)}$$

$$\langle\alpha|S_n^+|\alpha\rangle \simeq \sqrt{2S}\,\alpha_n , \qquad \langle\alpha|S_n|\alpha\rangle \simeq \sqrt{2S}\,\alpha_n .$$

Ako se iz (II 3.45) eliminišu fononske koordinate i pretpostavi $v \ll v_0$,dolazi se do efektivnog spinskog hamiltonijana:

$$\mathcal{H} = JS\left|\frac{\partial \alpha}{\partial x}\right|^2 - J\nu\left|\frac{\partial \alpha}{\partial x}\right|^4 , \qquad \text{(II 3.47)}$$

odakle za koherentne amplitude α ,dobijamo sledeću jednačinu:

$$i\hbar\frac{\partial \alpha}{\partial t} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \overset{*}{\alpha}} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \overset{*}{\alpha}_x}\right) =$$

$$= -JS\frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} + J\nu\frac{\partial^2 \overset{*}{\alpha}}{\partial x^2}\left(\frac{\partial \alpha}{\partial x}\right)^2 + 2J\nu\left|\frac{\partial \alpha}{\partial x}\right|^2\frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} . \qquad \text{(II 3.48)}$$

Ako pretpostavimo da je rešenje ove jednačine oblika:

$$\alpha(x,t) = \rho(x - vt)e^{i[\omega t + \phi(x - vt)]} , \qquad \text{(II 3.49)}$$

ograničimo se slučajem statičkih solitona ($v=0$) i uvedemo granične uslove:

$$\rho(\pm\infty) = 0 \quad , \quad \frac{\partial \rho}{\partial x}(\pm\infty) = 0 \quad , \qquad \text{(II 3.50)}$$

dobija se rešenje u obliku:

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)^2 = \frac{S}{3\nu} - \frac{S}{3\nu}\left(1 - 6\frac{\hbar\omega\nu}{JS^2}\rho^2\right)^{1/2} . \qquad \text{(II 3.51)}$$

Analiza ovog rezultata pokazuje da početni uslovi $\left.\frac{\partial \rho}{\partial x}\right|_{x=0}$ i $\rho(x_0) = \rho_0$,mogu biti zadovoljeni samo ako je $\rho_0 = 0$,što ukazuje da solitonska rešenja ne mogu da postoje u otsustvu spin-spin interakcije.

Opšti zaključak bi bio: stabilni solitoni u izotropnom Hajzenbergovom lancu ne mogu da se formiraju za račun spin-spin interakcije i to zbog disperzionog efekta (u jednačini (II 3.47) drugi član na desnoj strani je daleko manji od prvog).Ovaj zaključak je kompatibilan sa zaključkom iz /77/ po kome su magnetni solitoni de facto multimagnonska vezana stanja.

II 4. UTICAJ TEMPERATURE NA SOLITONE U FEROELEKTRICIMA

Do sada su analizirani solitoni koji nastaju u sistemu optičkih pobudjenja. Zbog visoke energije optičkih pobudjenja koja je reda 5eV, uticaj temperature na solitone je beznačajan, pa zato temperaturski efekti nisu uvodjeni u račun.

U feroelektricima tipa KDP javljaju se feroelektrična pobudjenja kao kolektivni efekt tunelovanja protona u potencijalnoj jami sa dvostrukim dnom /87-97/. Ova pobudjenja imaju energiju reda 0,01eV, pa je stoga feroelektrik veoma osetljiv na promene temperature /98/.

Prilikom ispitivanja solitona u feroelektricima tipa KDP temperatursku zavisnost ćemo analizirati sa dva aspekta. Jedan aspekat je promena parametra uredjenosti sa temperaturom, dok je drugi aspekt promena fononskog spektra sa temperaturom.

Hamiltonijan feroelektrika tipa KDP napisaćemo u reprezentaciji iz /99/ i to u takvoj aproksimaciji koja odgovara faznom prelazu druge vrste /100/. Za slučaj kada čvorovi u lancu O-H-O bondova ne osciluju, hamiltonijan ima sledeći oblik:

$$H_F^{(0)} = \frac{1}{2}\sum_{fg} I_{fg} P_f^+ P_f - \frac{1}{2}\sum_{fg} X_{fg} P_f^+ P_g - \frac{1}{2}\sum_{fg} I_{fg} P_f^+ P_f P_g^+ P_g .$$

(II 4.1)

U ovoj formi veličine I_{fg} karakterišu interakciju izmedju bondova, dok veličina X_{fg}, koja je proporcionalna energiji tunelovanja protona, karakteriše prenos pobudjenja sa čvora na čvor. Pauli-operatori P^+ i P su operatori kreacije i anihilacije feroelektričnih pobidjenja, respektivno. Veličine I i X su pozitivne.

Da bismo kroz parametar uredjenosti sistema:

$$\sigma = 1 - 2 \langle P^+ P \rangle , \qquad \text{(II 4.2)}$$

uzeli u obzir uticaj temperature na karakteristike feroelektričnih pobudjenja preći ćemo od hamiltonijana (II 4.1) na ekvivalentni bozonski hamiltonijan.

Ovaj ekvivalentni hamiltonijan formulisaćemo tako što ćemo zahtevati da on za bozonska pobudjenja daje isti zakon disperzije kao što ga imaju stvarna paulionska pobudjenja, u tjablikovskoj aproksimaciji /101/. Tjablikovska aproksimacija koristi se kod analiza metodom Grinovih funkcija i sastoji se u tome što se više paulionskih Grinovih funkcija dekupluje po pravilu:

$$\langle\langle P_a^+ P_a P_b | P_c^+ \rangle\rangle \approx \frac{1-\sigma}{2} \langle\langle P_b | P_c^+ \rangle\rangle . \qquad \text{(II 4.3)}$$

Ako se metodom funkcija Grina uz dekuplovanje tipa (II 4.3) analizira spektar pobudjenja hamiltonijana (II 4.1) onda se za zakon disperzije ovih pobudjenja dobija izraz:

$$E(k) = \frac{\sigma}{2}\left(I_o - X_k \right),$$

$$I_o = \sum_n I_{on}\ , \qquad X_n = \sum_n X_{on}\, e^{-ikna} \tag{II 4.4}$$

Na osnovu ovog rezultata i zahteva koji smo postavili prilikom definisanja ekvivalentnog bozonskog hamiltonijana, očigledno je da ekvivalentni bozonski hamiltonijan ima oblik:

$$H_o^{eq} = \frac{\sigma}{2}\sum_{fg} I_{fg} B_f^+ B_f - \frac{\sigma}{2}\sum_{fg} X_{fg} B_f^+ B_f\ . \tag{II 4.5}$$

Ako čvorovi posmatranog jednodimenzionog lanca bondova osciluju, onda:

$$f \to f + u_f\ , \quad g \to g + u_g\ , \quad I_{fg} \to I_{f-g+u_f-u_g}\ , \tag{II 4.6}$$
$$X_{fg} \to X_{f-g+u_f-u_g}\ .$$

Dalje možemo pisati:

$$I_{f-g+u_f-u_g} = \frac{1}{N} I_k\, e^{ika(f-g)}\, e^{ik(u_f-u_g)}\ ,$$

$$X_{f-g+u_f-u_g} = \frac{1}{N}\sum_k X_k\, e^{ika(f-g)}\, e^{ik(u_f-u_g)}\ . \tag{II 4.7}$$

Kao što je od ranije poznato razvijanjem eksponenta $e^{ik(u_f-u_g)}$ sa tačnošću do prvog stepena razlike pomeraja $(u_f - u_g)$ dobija se hamiltonijan interakcije osnovnih pobudjenja (u ovom slučaju feroelektričnih pobudjenja) sa fononima. Pošto želimo da uključimo temperaturske efekte i u fononski podsistem kao i u interakciju izmedju feroelektričnih pobudjenja i fonona eksponent $e^{i\kappa(u_f - u_g)}$ nećemo razvijati sa tačnošću do linearnih članova razlike $(u_f - u_g)$, već ćemo uzeti u obzir sve članove reda u koji se eksponent razvija.

Znači:

$$e^{i\kappa(u_f - u_g)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \kappa^{2n}}{(2n)!} (u_f - u_g)^{2n} +$$

$$+ i\kappa \frac{u_f - u_g}{(u_f - u_g)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \kappa^{2n}}{(2n+1)!} (u_f - u_g)^{2n+2} \equiv A_\kappa . \quad \text{(II 4.8)}$$

Dalje ćemo upotrebiti aproksimacije:

$$(u_f - u_g)^{2n} \approx \langle (u_f - u_g)^{2n} \rangle$$

$$(u_f - u_g)^{2n+2} \approx \langle (u_f - u_g)^{2n+2} \rangle$$

$$(u_f - u_g)^2 \approx \langle (u_f - u_g)^2 \rangle \quad \text{(II 4.9)}$$

tako da formula (II 4.8) postaje:

$$A_\kappa \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \kappa^{2n}}{(2n)!} \langle (u_f - u_g)^{2n} \rangle +$$

$$+ i\kappa (u_f - u_g) \frac{1}{\langle (u_f - u_g)^2 \rangle} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \kappa^{2n}}{(2n+1)!} \langle (u_f - u_g)^{2n+2} \rangle . \quad \text{(II 4.10)}$$

Dalje ćemo proračunati veličinu $\langle (u_f - u_g)^{2n} \rangle$ koja se može napisati, aproksimativno:

$$\langle (u_f - u_g)^{2n} \rangle = \langle \sum_{\nu=0}^{2n} (-1)^\nu \binom{2n}{\nu} u_f^{2n-\nu} u_g^\nu \rangle \approx$$

$$\approx \sum_{\nu=0}^{2n} (-1)^\nu \binom{2n}{\nu} \langle u_f^{2n-\nu} \rangle \langle u_g^\nu \rangle =$$

$$=\sum_{\mu=0}^{n}\binom{2n}{2\mu}\langle u^{2n-2\mu}\rangle\langle u^{2\mu}\rangle-\sum_{\mu=0}^{n-1}\binom{2n}{2\mu+1}\langle u^{2n-2\mu-1}\rangle\langle u^{2\mu+1}\rangle .$$

(II 4.11)

Navedene srednje vrednosti (II 4.11) bi trebalo, striktno govoreći, da se izračunaju metodom Grinovih funkcija uz korišćenje fononskog hamiltonijana:

$$H_p^{(0)}=\frac{1}{2M}\sum_f p_f^2+\frac{Q}{2}\sum_f (u_f-u_{f-1})^2 ,$$

(II 4.12)

gde je M masa molekula, Q konstanta sile i $p_f = M\dot{u}_f$ - molekulski impuls. Ovaj metod već kod proračuna $\langle u_f^2\rangle$ dovodi do poznatih singulariteta tipa q^{-2} /47/, tako da bi analiza ovim strogim metodom dala veoma komplikovane rezultate koje bi bilo teško protumačiti. Pošto je naš cilj da dobijemo samo kvalitativnu sliku o uticaju temperaturskih efekata, izvršićemo relativno grubo klasično usrednjavanje sa hamiltonijanom klasičnog oscilatora, koji ima istu konstantu sile Q kao i hamiltonijan (II 4.12). Znači:

$$\langle u^{2s}\rangle=\frac{\int_{-\infty}^{+\infty}du\, u^{2s}e^{-\beta\frac{Q}{2}u^2}}{\int_{-\infty}^{+\infty}du\, e^{-\beta\frac{Q}{2}u^2}} ,\qquad \beta=\frac{1}{k_BT}=\frac{1}{\Theta} .$$

(II 4.13)

Odavde je jasno da je $\langle u^{2n+1}\rangle=0$, pa stoga formulu (II 4.11) možemo napisati u obliku:

$$\langle (u_f - u_g)^{2n} \rangle = \sum_{\mu=0}^{n} \binom{2n}{2\mu} \langle u^{2n-2\mu} \rangle \langle u^{2\mu} \rangle .$$

(II 4.14)

Uvodeći oznaku:

$$J_\beta = \int_{-\infty}^{+\infty} du\, e^{-\beta \frac{Q}{2} u^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{Q}}\, \beta^{-\frac{1}{2}} ,$$

(II 4.15)

formulu (II 4.13) možemo napisati kao:

$$\langle u^{2s} \rangle = \frac{1}{J_\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} du\, u^{2s} e^{-\beta \frac{Q}{2} u^2} .$$

(II 4.16)

Uzastopnim diferenciranjem po β formule (II 4.15) dobijamo:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} du\, u^{2s} e^{-\beta \frac{Q}{2} u^2} = \frac{(2s)!}{2^s s!} \left(\frac{\Theta}{Q}\right)^s J_\beta ,$$

što zamenom u (II 4.16) daje:

$$\langle u^{2s} \rangle = \frac{(2s)!}{2^s s!} \left(\frac{\Theta}{Q}\right)^s .$$

(II 4.17)

Odavde sledi:

$$\langle u^{2n-2\mu} \rangle = \frac{(2n-2\mu)!}{2^{n-\mu}(n-\mu)!} \left(\frac{\Theta}{Q}\right)^{n-\mu} ,$$

$$\langle u^{2\mu} \rangle = \frac{(2\mu)!}{2^\mu \mu!} \left(\frac{\Theta}{Q}\right)^{\mu} ,$$

(II 4.18

$$\langle u^{2n-2\mu}\rangle\langle u^{2\mu}\rangle = \frac{(2n-2\mu)!\,(2\mu)!}{(n-\mu)!\,\mu!}\,\frac{1}{2^n}\left(\frac{\Theta}{Q}\right)^n ,$$

što zamenom u (II 4.14) daje:

$$\langle (u_f - u_g)^{2n}\rangle = \frac{(2n)!}{n!}\left(\frac{\Theta}{Q}\right)^n ,$$

$$\langle (u_f - u_g)^{2n+2}\rangle = \frac{(2n+2)!}{(n+1)!}\left(\frac{\Theta}{Q}\right)^{n+1} , \qquad \text{(II 4.19)}$$

$$\langle (u_f - u_g)^2\rangle = 2\,\frac{\Theta}{Q} .$$

Zamenom (II 4.19) u (II 4.10) dobijamo konačno:

$$e^{i\kappa(u_f - u_g)} = e^{-\kappa^2\frac{\Theta}{Q}}\left[1 + i\kappa(u_f - u_g)\right] . \qquad \text{(II 4.20)}$$

Ako (II 4.20) zamenimo u (II 4.7) i dobijene izraze uvrstimo u hamiltonijan (II 4.5) umesto I_{fg} i X_{fg} onda $H_0^{eq} \to H^{eq}$,pri čemu se u aproksimaciji najbližih suseda može pisati:

$$H_{eq} = H_F + H_{Fp} \qquad \text{(II 4.21)}$$

gde je:

$$H_F = 2D(\theta)\sum_n B_n^+ B_n - R(\theta)\sum_n \left(B_n^+ B_{n+1} + B_n^+ B_{n-1}\right) ,$$

$$D(\theta) = \sigma I N^{-1}\sum_K e^{-\kappa^2\frac{\Theta}{Q}}\cos^2 a\kappa \; ; \quad \lim_{\theta\to 0} D(\theta) = \frac{I}{2} ,$$

$$R(\theta) = \sigma X N^{-1}\sum_K e^{-\kappa^2\frac{\Theta}{Q}}\cos^2 a\kappa \; ; \quad \lim_{\theta\to 0} R(\theta) = \frac{X}{2} , \qquad \text{(II 4.22)}$$

i

$$H_{Fp} = J_R(\theta)\sum_n \left[B_n^+ B_{n+1}(u_{n+1} - u_n) + B_n^+ B_{n-1}(u_n - u_{n-1})\right] -$$

$$- J_D(\theta)\sum_n B_n^+ B_n (u_{n+1} - u_{n-1})$$

$$J_R(\theta) = \sigma X N^{-1}\sum_k k e^{-k^2 \frac{\theta}{Q}} \sin ak \cos ak \; ; \quad \lim_{\theta \to 0} J_R(\theta) = \frac{1}{2}\sum_k k X_k \sin ak ,$$

$$J_D(\theta) = \sigma I N^{-1}\sum_k k e^{-k^2 \frac{\theta}{Q}} \sin ak \cos ak \; ; \quad \lim_{\theta \to 0} J_D(\theta) = \frac{1}{2}\sum_k k I_k \sin ak .$$

(II 4.23)

Koristeći slične ideje i aproksimacije, uvešćemo temperaturske efekte i u hamiltonijan fononskog podsistema. Startovaćemo od potencijalne energije, "zamrznutog" kristala koju ćemo napisati u obliku:

$$U_0 = -\frac{1}{2}\sum_{fg} V_{f-g} \; . \qquad \text{(II 4.24)}$$

Ukoliko čvorovi rešetke osciluju onda:

$$f \to f + u_f , \quad g \to g + u_g , \quad V_{f-g} \to V_{f-g+u_f-u_g} , \qquad \text{(II 4.25)}$$

dok potencijalna energija postaje:

$$U = U_0 - \frac{1}{2N}\sum_{fgk} V_k e^{ika(f-g)} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} (u_f - u_g)^m$$

(II 4.26)

Odavde je popravka na potencijalnu energiju usled oscilovanja molekula data izrazom:

$$U_{osc} = U - U_0 = -\frac{1}{2N}\sum_{fgk} V_k\, e^{ika(f-g)}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{(ik)^m}{m!}(u_f-u_g)^m. \qquad \text{(II 4.27)}$$

Dalje ćemo analizirati veličinu:

$$A_{fg} = \sum_{m=1}^{\infty}\frac{(ik)^m}{m!}(u_f-u_g)^m = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n k^{2n}}{(2n)!}(u_f-u_g)^{2n} +$$

$$+\, i\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n k^{2n+1}}{(2n+1)!}(u_f-u_g)^{2n+1}. \qquad \text{(II 4.28)}$$

Ovde ćemo izvršiti aproksimacije:

$$(u_f-u_g)^{2n+1} \approx \langle (u_f-u_g)^{2n+1}\rangle = 0 \qquad \text{(II 4.29)}$$

i

$$(u_f-u_g)^{2n} \approx (u_f-u_g)^2 \langle (u_f-u_g)^{2n-2}\rangle \approx$$

$$\approx \frac{\langle u_f-u_g\rangle^2}{\langle (u_f-u_g)^2\rangle}\langle (u_f-u_g)^{2n}\rangle. \qquad \text{(II 4.30)}$$

Koristeći (II 4.19) nalazimo:

$$\langle (u_f-u_g)^{2n}\rangle = \frac{2Q}{\Theta}(u_f-u_g)^2\frac{2n!}{n!}\left(\frac{\Theta}{Q}\right)^n, \qquad \text{(II 4.31)}$$

tako da se može pisati:

$$A_{fg} = -\frac{Q}{\Theta}\, e^{-\frac{k^2}{2}\frac{\Theta}{Q}}\, sh\,\frac{k^2}{2}\frac{\Theta}{Q}(u_f-u_g)^2 \qquad \text{(II 4.32)}$$

odnosno:

$$U_{osc} = \frac{1}{2N}\frac{Q}{\Theta}\sum_{fgK} V_K e^{iKa(f-g)} e^{-\frac{K^2}{2}\frac{\Theta}{Q}} sh\,\frac{K^2}{2}\frac{\Theta}{Q}(u_f-u_g)^2 \tag{II 4.33}$$

Ako (II 4.33) napišemo u aproksimaciji najbližih suseda nalazimo:

$$U_{osc} = \frac{Q(\Theta)}{2}\sum_n (u_n - u_{n-1})^2 \tag{II 4.34}$$

gde je:

$$Q(\Theta) = 2\frac{Q}{\Theta}N^{-1}\sum_K V_K e^{-\frac{K^2}{2}\frac{\Theta}{Q}} sh\,\frac{K^2}{2}\frac{\Theta}{Q}\cos aK\,. \tag{II 4.35}$$

Iz (II 4.35) sledi:

$$Q(0) = N^{-1}\sum_K K^2 V_K \cos aK = Q \tag{II 4.36}$$

što znači da se hamiltonijan fononskog podsistema može napisati u obliku:

$$H_p = \frac{1}{2M}\sum_n p_n^2 + \frac{Q(\Theta)}{2}\sum_n (u_n - u_{n-1})^2\,. \tag{II 4.37}$$

Na osnovu dosadašnjih rezultata solitone u feroelektriku analiziraćemo sa hamiltonijanom:

$$\begin{aligned} H = {} & D(\Theta)\sum_n B_n^+B_n - R(\Theta)\sum_n B_n^+(B_{n+1}+B_{n-1}) + \\ & + \frac{1}{2M}\sum_n p_n^2 + \frac{Q(\Theta)}{2}\sum_n (u_n-u_{n-1})^2 + \\ & + J_R(\Theta)\sum_n\left[B_n^+B_{n+1}(u_{n+1}-u_n) + B_n^+B_{n-1}(u_n-u_{n-1})\right] - \\ & - J_D(\Theta)\sum_n B_n^+B_n(u_{n+1}-u_{n-1}) \end{aligned} \tag{II 4.38}$$

Pre nego što predjemo na analizu solitonskih stanja naći ćemo temperatursku zavisnost parametra uredjenosti σ koji figuriše u veličinama $D(\theta)$, $R(\theta)$, $J_D(\theta)$ i $J_R(\theta)$ .Ovu temperatursku zavisnost ispitaćemo koristeći metod Grinovih funkcija /101,102/ i feroelektrični hamiltonijan (II 4.1).

Jednačina za jednočestičnu Grinovu funkciju $\langle\langle P_f(t) \mid P_g^+(0) \rangle\rangle$ glasi:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle\langle P_f(t) \mid P_g^+(0) \rangle\rangle = i\hbar\, \delta(t)\, \delta_{fg}\, \sigma +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_m I_{fm} \langle\langle P_f(t) \mid P_g^+(0) \rangle\rangle - \frac{1}{2} \sum_m X_{fm} \langle\langle P_m(t) \mid P_g^+(0) \rangle\rangle +$$

$$+ \sum_m X_{fm} \langle\langle P_f^+(t)\, P_f(0)\, P_m(t) \mid P_g^+(0) \rangle\rangle -$$

$$- \sum_m I_{fm} \langle\langle P_m^+(t)\, P_m(t)\, P_f(t) \mid P_g^+(0) \rangle\rangle ,$$

i ona posle tjablikovskog dekuplovanja i Furije-transformacije prostor-impuls i vreme-frekvencija postaje:

$$\langle\langle P \mid P^+ \rangle\rangle_{k,\omega} = \frac{i}{2\pi} \frac{\sigma}{\omega - \frac{\sigma E_k}{2\hbar}} , \quad E_k = I_0 - X_k . \tag{II 4.39}$$

Koristeći teoremu o spektralnoj intenzivnosti /101,102/ nalazimo:

$$\langle P_k^+ \mid P_k \rangle = \frac{\sigma}{e^{\frac{\sigma E_k}{2\theta}} - 1} , \tag{II 4.40}$$

odakle je:

$$\sigma = \frac{1}{\frac{1}{N}\sum_{k} \operatorname{ctgh} \frac{\sigma E_k}{2\theta}} . \qquad \text{(II 4.41)}$$

Poslednja relacija daje implicitnu zavisnost parametra uredjenosti σ od temperature θ.

U okolini temperature prelaza $\sigma \to 0$ i može se približno pisati /101/:

$$\operatorname{ctgh} \frac{\sigma E_k}{2\theta} \approx \frac{2\theta}{\sigma E_k} + \frac{1}{3}\frac{\sigma E_k}{2\theta} , \qquad \text{(II 4.42)}$$

tako da iz formule (II 4.41) dobijamo:

$$\sigma = \sqrt{\frac{3}{C_0}\left(1 - \frac{\theta}{\theta_c}\right)} , \quad \theta_c = \frac{I}{C_0} , \quad C_0 = \frac{1}{N}\sum_{n} \frac{1}{1 - \frac{X_k}{I(0)}} ,$$

$$I(0) = 2I . \qquad \text{(II 4.43)}$$

Na osnovu ove formule vidimo da kada $\theta \to \theta_c$ veličine $D(\theta)$, $R(\theta)$, $J_D(\theta)$ i $J_R(\theta)$ teže nuli po zakonu $(\theta_c - \theta)^{1/2}$.

Pošto smo našli temperatursku zavisnost svih relevantnih parametara koji figurišu u hamiltonijanu (II 4.38), možemo preći na analizu solitonskih stanja u feroelektriku. Analiza solitonskih stanja vršena je više puta u prethodnom tekstu, tako da ćemo proceduru veoma kratko opisati i navesti završne rezultate.

Startuje se od jednočestične funkcije feroelektričnih pobudjenja:

$$|\Psi\rangle = \sum_{f} A_f(t) B_f^{+} |0_F\rangle , \quad \sum_{f} |A_f(t)|^2 = 1 , \qquad \text{(II 4.44)}$$

gde $|0_F\rangle$ označava vakuum za feroelektrična pobudjenja. Šredingerova jednačina za funkciju $|\Psi\rangle$,usrednjena po koherentnim fononskim stanjima $|C_p\rangle$, posle prelaska u kontinuum daje jednačinu za amplitudu A koja je sledećeg oblika:

$$i\hbar\frac{\partial A}{\partial t}=\left[C(\theta)+2D(\theta)-2R(\theta)\right]A-a^2R(\theta)\frac{\partial^2 A}{\partial x^2}+2\chi(\theta)\frac{\partial\beta}{\partial x}, \tag{II 4.45}$$

gde je:

$$\chi(\theta)=a\left[J_R(\theta)-J_D(\theta)\right]. \tag{II 4.46}$$

Kombinovana jednačina kretanja za fononske operatore daje:

$$\frac{\partial^2\beta}{\partial t^2}-v_0^2(\theta)\frac{\partial^2\beta}{\partial x^2}=\frac{2\chi(\theta)}{M}\frac{\partial}{\partial x}(\overset{*}{A}A), \tag{II 4.47}$$

gde je:

$$v_0^2(\theta)=a^2\frac{Q(\theta)}{M}=\frac{a^2}{M}\frac{Q}{\theta}\sum_K V_K\left(1-e^{-K^2\frac{\theta}{Q}}\right)\cos aK. \tag{II 4.48}$$

Uslov normiranja (II 4.44) u kontinualnoj aproksimaciji glasi:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,|A(x,t)|^2=a, \tag{I 4.49}$$

dok je u istoj ovoj aproksimaciji konstanta $C(\theta)$ data izrazom:

$$C(\theta)=\frac{1}{2a}\int_{-\infty}^{+\infty}dx\left[M\left(\frac{\partial\beta}{\partial t}\right)^2+Qa^2\left(\frac{\partial\beta}{\partial x}\right)^2\right]. \tag{II 4.50}$$

Rešenje sistema jednačina (II 4.45) i (II 4.47) tražimo u obliku:

$$A(x,t) = f(\xi)\, e^{i\kappa x - i\omega t}, \qquad \text{(II 4.51)}$$

$$\overset{*}{f}(\xi) = f(\xi), \quad \xi = x - \vartheta_{\kappa}(\theta) t, \quad \beta(x,t) \to \beta(\xi),$$

gde je:

$$\vartheta_{\kappa}(\theta) = \frac{2a^2 R(\theta)}{\hbar} \kappa . \qquad \text{(II 4.52)}$$

Standardnim postupkom nalazimo:

$$f(\xi) = \sqrt{\frac{\tau}{\Omega}}\, \frac{1}{ch\, \xi\sqrt{\tau}}, \qquad \text{(II 4.53)}$$

gde je:

$$\tau \equiv \tau(\kappa, E) = \frac{C(\theta) + 2D(\theta) - 2R(\theta) + R(\theta) a^2 \kappa^2 - E}{a^2 R(\theta)}; \quad E = \hbar\omega \qquad \text{(II 4.54)}$$

i

$$\Omega \equiv \Omega(\kappa) = \frac{2\chi^2(\theta)}{a^2 R(\theta) M \left[\vartheta_0^2(\theta) - \vartheta_{\kappa}^2(\theta) \right]} . \qquad \text{(II 4.55)}$$

Konstanta $C(\theta)$ je data izrazom:

$$C(\theta) = \frac{2}{3}\, \frac{1 + \nu_{\kappa}^2(\theta)}{1 - \nu_{\kappa}^2(\theta)}\, \frac{\chi^4(\theta)}{R(\theta) M \vartheta_0^4(\theta) \left[1 - \nu_{\kappa}^2(\theta)\right]^2}, \qquad \text{(II 4.56)}$$

gde je:

$$\nu_{\kappa}(\theta) = \frac{\vartheta_{\kappa}(\theta)}{\vartheta_0(\theta)} . \qquad \text{(II .57)}$$

Na osnovu ovih rezultata iz uslova normiranja nalazimo energiju solitona u feroelektriku:

$$E_F(\kappa,\theta) = 2D(\theta) - 2R(\theta) + R(\theta)a^2\kappa^2 -$$

$$- \frac{\chi^4(\theta)}{R(\theta) M v_0^4(\theta)\left[1 - \nu_\kappa^2(\theta)\right]^2}\left[1 - \frac{2}{3}\,\frac{1+\nu_\kappa^2(\theta)}{1-\nu_\kappa^2(\theta)}\right] . \tag{II 4.58}$$

Normirana amplituda data je izrazom:

$$A(x,t) = \frac{a\Omega^{1/2}}{2}\,\frac{e^{i\kappa x - i\frac{E_F(\kappa,\theta)}{\hbar}t}}{ch\,\frac{a\Omega}{2}\,\xi} , \tag{II 4.59}$$

dok izraz za efektivnu masu solitona ima oblik:

$$m_{FS}(\theta) = \frac{\hbar^2}{2a^2R(\theta)} + \frac{\chi^4(\theta)}{3a^4Q^2(\theta)\,v_0^2(\theta)} . \tag{II 4.60}$$

U rezimeu izvršenih analiza može se kao bitno zaključiti sledeće:

a) Solitonska popravka energije feroelektričnih pobudjenja opada pri $\theta \to \theta_c$ po zakonu $(\theta_c - \theta)^{3/2}$. U isto vreme energija feroelektričnih pobudjenja opada po zakonu $(\theta_c - \theta)^{1/2} e^{-\frac{\kappa^2}{Q}\theta}$.

b) Brzina solitona pri $\theta \to \theta_c$ opada po zakonu $(\theta_c - \theta)^{1/2} e^{-\frac{\kappa^2}{Q}\theta}$,dok brzina zvuka opada po zakonu $\frac{1}{\theta}$.

c) Solitonska amplituda menja se po zakonu $\theta(\theta_c - \theta)^{1/4}$ i postaje ravna nuli za $\theta = \theta_c$.

Opšti zaključak je da pri porastu temperature opadaju solitonska amplituda ,brzina solitona i brzina zvuka.Pošto solitonska popravka pri $\theta \to \theta_c$ brže opada nego energija feroelektričnih pobudjenja to znači da se sa približavanjem temperaturi prelaza,solitoni se po energiji približavaju normalnim feroelektričnim pobudjenjima. Zbog ovoga se nastanak solitona pre može očekivati na nižim temperaturama.Na temperaturama bliskim temperaturi prelaza, razlika izmedju solitona i feroelektričnih pobudjenja postaje neznatna,bar na energetskoj skali.

G L A V A III

K V A Z I K L A S I Č N A T E O R I J A B I S O L I T O N A

III 1. OSNOVE TEORIJE BISOLITONA

U dosadašnjim analizama solitona mogli smo da konstatujemo da ova elementarna pobudjenja imaju dosta sličnosti sa eksitonima. Poznato je da eksitoni obrazuju vezana stanja /103-106/ -bieksitone- pa je prirodno da se postavi pitanje o mogućnosti obrazovanja vezanih solitonskih stanja - bisolitona. Analizu ovog pitanja izvršićemo u granicama kvaziklasičnog prilaza koristeći dvočestičnu eksitonsku funkciju:

$$|\Psi_2\rangle = \sum_{nm} A_{nm}(t) B_n^+ B_m^+ |0_e\rangle , \qquad \text{(III 1.1)}$$

u kojoj koeficijenti A_{nm} zadovoljavaju simetrijsku relaciju:

$$A_{nm}(t) = A_{mn}(t) , \qquad \text{(III 1.2)}$$

i uslov normiranja:

$$\sum_{nm} |A_{nm}|^2 = \frac{1}{2} , \qquad \text{(III 1.3)}$$

i funkciju koherentnih fononskih stanja:

$$|C_p\rangle = e^{-i\hat{S}} |0_p\rangle , \qquad \text{(III 1.4)}$$

gde je:

$$\hat{S} = \frac{1}{\hbar}\sum_{n}\left[\beta_n(t)\,p_n - \pi_n(t)\,u_n\right] \qquad \text{(III 1.5)}$$

Hamiltonijan sistema uzećemo u obliku (vidi I 2.):

$$H = H_e + H_p + H_{ep}\,, \qquad \text{(III 1.6)}$$

gde je:

$$H_e = H_{oe} + \Delta\sum_{n} B_n^+ B_n - R\sum_{n} B_n^+(B_{n+1} + B_{n-1})$$

$$H_{oe} = N\mathcal{E}_o - \frac{1}{2}\sum_{nm} V_{nm}(0000)\,,$$

$$\Delta = \mathcal{E}_f - \mathcal{E}_o + 2D\,, \quad R > 0\,, \qquad \text{(III 1.7)}$$

hamiltonijan eksitonskog podsistema,

$$H_p = \frac{1}{2M}\sum_{n} p_n^2 + \frac{Q}{2}\sum_{n}(u_n - u_{n-1})^2\,, \qquad \text{(III 1.8)}$$

hamiltonijan fononskog podsistema,i

$$H_{ep} = J_R\sum_{n}(B_n^+ B_{n-1} + B_{n-1}^+ B_n)(u_n - u_{n-1}) - J_D\sum_{n} B_n^+ B_n(u_{n+1} - u_{n-1})\,,$$

$$J_R = N^{-1}\sum_{k} k R_k \sin ak\,, \quad J_D = N^{-1}\sum_{k} k D_k \sin ak\,, \qquad \text{(III 1.9)}$$

hamiltonijan eksiton-fonon interakcije,uzet u linearnoj aproksimaciji po molekulskim pomerajima u .Ovde treba naglasiti,da bi,pošto se analizira dvočestična eksitonska funkcija (III 1.1), u H_e i H_{ep} trebalo bi uključiti i članove četvrtog reda po eksitonskim operatorima.Mi to nećemo činiti,a razloge za ovo navešćemo na kraju ovog paragrafa. Što se tiče formalno matematičkog prilaza problemu primenićemo proceduru koja je opisana u paragrafu I .5,što znači da ćemo Šredingerovu jednačinu za funkciju $|\Psi_2\rangle$ usrednjiti po koherentnim fononskim stanjima $|C_p\rangle$,a jednačine kretanja za fononske operatore ćemo usrednjiti po stanjima $|\Psi_2\rangle|C_p\rangle$ .Ovaj postupak,kao što smo videli daje apsolutno iste rezultat kao i standardni postupak izložen u paragrafu I 2.,ali je nešto jednostavniji i to je razlog zbog koga ćemo ga ovde primeniti.Isti ovakav postupak primenjen je u radu /107/.Nešto drukčiji prilaz korišćen je u /108/.

Ako na Šredingerovu jednačinu $i\hbar\frac{\partial|\Psi_2\rangle}{\partial t} = H|\Psi_2\rangle$ primenimo s leva operator $\langle O_e|\overset{*}{A}_{nm}(t)B_mB_n$ i rezultat usrednjimo po stanjima $|C_p\rangle$,dolazimo do sledeće diferencne jednačine za koeficijente A_{nm} :

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial A_{nm}}{\partial t} &= (E_g+C_B+2\Delta)A_{nm} - R(A_{n+1,m}+A_{n-1,m}+A_{n,m+1}+A_{n,m-1}) + \\ &+ J_R\left[A_{n+1,m}(\beta_{n+1}-\beta_n)+A_{n-1,m}(\beta_n-\beta_{n-1}) + \right. \\ &\left. + A_{n,m+1}(\beta_{m+1}-\beta_m)+A_{n,m-1}(\beta_m-\beta_{m-1})\right] - \\ &- J_D(\beta_{n+1}-\beta_{n-1}+\beta_{m+1}-\beta_{m-1})A_{nm} \end{aligned} \qquad \text{(III 1.10)}$$

gde je:

$$E_g = H_{oe}+H_{op}\ , \qquad H_{op} = \frac{1}{2}\sum_K \hbar\omega_K\ ,$$

$$\omega_K = v_0|K|\ , \quad v_0^2 = a^2\frac{Q}{M}\ , \qquad \text{(III 1.11)}$$

i

$$C_B = \sum_n \left[\frac{1}{2M} \Pi_n^2 + \frac{Q}{2} (\beta_n - \beta_{n-1})^2 \right].$$

(III 1.12)

Usrednjena po stanjima $|\Psi_2\rangle |C_P\rangle$ kombinovana jednačina za fononske operatore ima oblik:

$$\frac{\partial^2 \beta_n}{\partial t^2} = \frac{Q}{M} (\beta_{n+1} + \beta_{n-1} - 2\beta_n) +$$

$$+ \frac{4J_R}{M} \sum_m (\overset{*}{A}_{nm} A_{n+1,m} - \overset{*}{A}_{nm} A_{n-1,m} + \overset{*}{A}_{n+1,m} A_{nm} - \overset{*}{A}_{n-1,m} A_{nm}) -$$

$$- \frac{4J_D}{M} \sum_m (\overset{*}{A}_{n+1,m} A_{n+1,m} - \overset{*}{A}_{n-1,m} A_{n-1,m}).$$

(III 1.13)

Zbog simetrije računa napisaćemo i odgovarajuću jednačinu za $\frac{\partial^2 \beta}{\partial t^2}$ koja glasi:

$$\frac{\partial^2 \beta_m}{\partial t^2} = \frac{Q}{M} (\beta_{m+1} + \beta_{m-1} - 2\beta_m) +$$

$$+ \frac{4J_R}{M} \sum_n (\overset{*}{A}_{nm} A_{n,m+1} - \overset{*}{A}_{n,m-1} + \overset{*}{A}_{n,m+1} A_{nm} - \overset{*}{A}_{n,m-1} A_{nm}) -$$

$$- \frac{4J_D}{M} \sum_n (\overset{*}{A}_{n,m+1} A_{n,m+1} - \overset{*}{A}_{n,m-1} A_{n,m-1})$$

(III 1.14)

Ako u jednačinama (III 1.10),(III 1.13) i (III 1.14) predjemo na kontinuum:

$$A_{nm}(t) \to A(x,y;t) \quad , \beta_n(t) \to \beta(x,t) , \quad \beta_m(t) \to \beta(y,t)$$

(III 1.14)

jednačine (III 1.10).(III 1.13) i (III 1.14) se svode,respektivno,na:

$$i\hbar\frac{\partial A}{\partial t}=(E_g+C_B+2\Delta-4R)A-a^2R\left(\frac{\partial^2 A}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 A}{\partial y^2}\right)+2\chi A\left(\frac{\partial\beta}{\partial x}+\frac{\partial\beta}{\partial y}\right),$$

(III 1.15)

$$\chi=a(J_R-J_D),$$

(III 1.16)

$$\Delta=\mathcal{E}_f-\mathcal{E}_0+2D,$$

$$\frac{\partial^2\beta}{\partial t^2}-v_0^2\frac{\partial^2\beta}{\partial x^2}=\frac{8\chi}{Ma}\frac{\partial}{\partial x}\int_{-\infty}^{+\infty}dy\,|A(x,y;t)|^2,$$

(III 1.17)

$$\frac{\partial^2\beta}{\partial t^2}-v_0^2\frac{\partial^2\beta}{\partial y^2}=\frac{8\chi}{Ma}\frac{\partial}{\partial y}\int_{-\infty}^{+\infty}dy\,|A(x,y;t)|^2. \tag{III 1.18}$$

U kontinualnoj aproksimaciji je:

$$C_B=\frac{1}{4a}\left\{\int_{-\infty}^{+\infty}dx\left[\frac{1}{M}\left(\frac{\partial\beta}{\partial t}\right)^2+Qa^2\left(\frac{\partial\beta}{\partial x}\right)^2\right]+\right.$$

$$\left.+\int_{-\infty}^{+\infty}dy\left[\frac{1}{M}\left(\frac{\partial\beta}{\partial t}\right)^2+Qa^2\left(\frac{\partial\beta}{\partial y}\right)^2\right]\right\}. \tag{III 1.19}$$

Rešenje jednačine (III 1.16) potražićemo u obliku:

$$A(x,y;t)=f_1(\xi)f_2(\eta)e^{i\kappa\frac{x+y}{2}-i\omega t}$$

(III 1.20)

$$\overset{*}{f_1}=f_1\;,\quad \overset{*}{f_2}=f_2\;,$$

gde je:

$$\xi=x-v_{BK}t\;,\quad \eta=y-v_{BK}t\;, \tag{III 1.21}$$

i

$$\vartheta_{BK} = \frac{a^2 R}{\hbar} K \, . \qquad \text{(III 1.22)}$$

Koordinata $\frac{x+y}{2}$ predstavlja koordinatu centra mase dva jednaka solitona. Ako uzmemo da:

$$\beta(x,t) \to \beta(\xi) \quad \text{i} \quad \beta(y,t) \to \beta(\eta) \qquad \text{(III 1.23)}$$

jednačina (III 1.16) postaje:

$$\frac{f_1''(\xi)}{f_1(\xi)} + \frac{f_2''(\eta)}{f_2(\eta)} = \frac{C_B + 2\Delta - 4R + 1/2\, a^2 K^2 R - E}{a^2 R} + \frac{2\chi}{a^2 R}\left(\frac{\partial\beta}{\partial\xi} + \frac{\partial\beta}{\partial\eta}\right) , \qquad \text{(III 1.24)}$$

gde je:

$$E = \hbar\omega - E_g \qquad \text{(III 1.25)}$$

i

$$C_B = \frac{M(\vartheta_0^2 + \vartheta_{BK}^2)}{4a}\left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \left(\frac{\partial\beta}{\partial\xi}\right)^2 + \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \left(\frac{\partial\beta}{\partial\eta}\right)^2\right] . \qquad \text{(III 1.26)}$$

S obzirom na (III 1.23) jednačine (III 1.17) i(III 1.18) postaju:

$$\frac{\partial^2\beta}{\partial\xi^2} = -\frac{8\chi D_2}{Ma(\vartheta_0^2 - \vartheta_{BK}^2)} \frac{\partial}{\partial\xi} f_1^2(\xi) ,$$

$$\frac{\partial^2\beta}{\partial\eta^2} = -\frac{8\chi D_1}{Ma(\vartheta_0^2 - \vartheta_{BK}^2)} \frac{\partial}{\partial\eta} f_2^2(\eta) , \qquad \text{(III 1.27)}$$

gde je:

$$D_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} d\zeta f_1^2(\zeta) \ , \qquad \text{(III 1.28)}$$

i

$$D_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta f_2^2(\eta) \ . \qquad \text{(III 1.29)}$$

Posle integracije po ζ ,odnosno po η (integracione konstante uzimamo ravne nuli) jednačine (III 1.27) postaju:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \beta}{\partial \zeta} &= - \frac{8\chi D_2}{Ma(\vartheta_0^2 - \vartheta_{BK}^2)} f_1^2(\zeta) \ , \\ \frac{\partial \beta}{\partial \eta} &= - \frac{8\chi D_1}{Ma(\vartheta_0^2 - \vartheta_{BK}^2)} f_2^2(\eta) \ . \end{aligned} \qquad \text{(III 1.30)}$$

Zamenom (III 1.30) u (III 1.24) dolazimo do jednačine:

$$\frac{f_1''(\zeta)}{f_1(\zeta)} + \frac{f_2''(\eta)}{f_2(\eta)} = \Theta(\kappa,E) - 2\Omega(\kappa)\left[D_2 f_1^2(\zeta) + D_1 f_2^2(\eta)\right] , \qquad \text{(III 1.31)}$$

gde je:

$$\Theta(\kappa,E) = \frac{2\Delta - 4R + 1/2\, R a^2 \kappa^2 - E}{a^2 R} \qquad \text{(III 1.32)}$$

i

$$\Omega(\kappa) = \frac{8\chi^2}{a^3 R M(\vartheta_0^2 - \vartheta_{BK}^2)} \ . \qquad \text{(III 1.33)}$$

Posle razdvajanja promenljivih u (III 1.1) za odredjivanje funkcija f_1 i f_2 dobijamo sledeće jednačine:

$$f_1'' = \left(\frac{\Theta}{2} + F\right) f_1 - 2\Omega D_2 f_1^3 = 0 \; ,$$
$$f_2'' = \left(\frac{\Theta}{2} - F\right) f_2 - 2\Omega D_1 f_2^3 = 0 \; , \qquad \text{(III 1.32)}$$

gde je F proizvoljna konstanta,nastala u procesu razdvajanja promenljivih.

Uslov normiranja (III 1.3),napisan u kontinuumu ima oblik:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \, d\eta \, f_1^2(\xi) \, f_2^2(\eta) = \frac{a^2}{2} \; , \qquad \text{(III 1.33)}$$

i jedina rešenja jednačina (III 1.32) koja se mogu normirati uslovom (III 1.33) su:

$$f_1(\xi) = \sqrt{\frac{\frac{\Theta}{2} + F}{\Omega D_2}} \; \frac{1}{ch\, \xi \sqrt{\frac{\Theta}{2} + F}} \; , \qquad \text{(III 1.34)}$$

$$f_2(\eta) = \sqrt{\frac{\frac{\Theta}{2} - F}{\Omega D_1}} \; \frac{1}{ch\, \eta \sqrt{\frac{\Theta}{2} - F}} \; . \qquad \text{(III 1.35)}$$

U prvoj fazi daljeg računa,odredićemo proizvoljnu konstantu F .Ako (III 1.34)zamenimo u (III 1.28) dolazimo do rezultata $D_1 D_2 = \frac{1}{\Omega} 2\sqrt{\frac{\Theta}{2} + F}$ .Ako (III 1.35) zamenimo u (III 1.29)dobija se $\frac{1}{\Omega} 2\sqrt{\frac{\Theta}{2} - F}$ .Odavde sledi:

$$F = 0, \quad D_1 D_2 = \frac{1}{\Omega} \sqrt{2\Theta} \; . \qquad \text{(III 1.36)}$$

Na osnovu ovoga rezultata možemo pisati:

$$f_1(\xi) = \sqrt{\frac{\Theta}{2\Omega D_2}}\ \frac{1}{ch\,\xi\sqrt{\frac{\Theta}{2}}}\ ,$$

(III 1.37)

$$f_2(\eta) = \sqrt{\frac{\Theta}{2\Omega D_1}}\ \frac{1}{ch\,\eta\sqrt{\frac{\Theta}{2}}}\ .$$

Ako (III 1.37) zamenimo u uslovu normiranja (III 1.33) dolazimo do relacije:

$$\left(C_B + E_g + 2\Delta - 4R + \frac{1}{2}a^2\kappa^2 R - E\right)^{1/2} = \frac{2\sqrt{2}\ \chi^2}{R^{1/2} M v_0^2 (1 - \nu_{BK}^2)}\ ,$$

(III 1.38)

gde je:

$$\nu_{BK} = \frac{v_{BK}}{v_0}\ . \tag{III 1.39}$$

Posle zamene (III 1.34) i (III 1.35) u (III 1.30) sledi:

$$\frac{\partial\beta}{\partial\xi} = -\frac{4\chi\Theta}{aM\Omega v_0^2(1-\nu_{BK}^2)}\ \frac{1}{ch\,\xi\sqrt{\frac{\Theta}{2}}}$$

(III 1.40)

$$\frac{\partial\beta}{\partial\eta} = -\frac{4\chi\Theta}{aM\Omega v_0^2(1-\nu_{BK}^2)}\ \frac{1}{ch\,\eta\sqrt{\frac{\Theta}{2}}}$$

Zamenom (III 1.40) u izrazu za C_B (III 1.26) daje:

$$\left(C_B + E_g + 2\Delta - 4R + \frac{1}{2}a^2\kappa^2 R - E\right)^{3/2} = \frac{6\chi^2 R^{3/2}}{\sqrt{2}\,R^2 M v_0^2 (1+\nu_{BK}^2)}\; C_B \;.$$

(III 1.41)

Kombinujući (III 1,41) i (III 1.38) nalazimo:

$$C_B = \frac{2}{3}\,\frac{1+\nu_{BK}^2}{1-\nu_{BK}^2}\;\frac{8\chi^4}{RM^2 v_0^4 (1-\nu_{BK}^2)^2}\;. \qquad \text{(III 1.42)}$$

Zamenom ovog rezultata u (III 1.38) dobijamo izraz za energiju bisolitona:

$$E_B(\kappa) = 2\Delta - 4R + \frac{1}{2}a^2\kappa^2 R - \frac{8\chi^4}{RM^2 v_0^4 (1-\nu_{BK}^2)^2}\left(1 - \frac{2}{3}\,\frac{1+\nu_{BK}^2}{1-\nu_{BK}^2}\right). \qquad \text{(III 1.43)}$$

U aproksimaciji malih talasnih vektora (sa tačnošću do κ^2 zaključno) formulu (III 1.43) možemo napisati u obliku:

$$E_B(\kappa) = E_B(0) + \frac{1}{2} m_B v_{BK}^2\,, \qquad \text{(III 1.44)}$$

gde je:

$$E_B(0) = 2\Delta - 4R - \frac{8\chi^4}{3RQ^2a^4}\,, \qquad \text{(III 1.45)}$$

energija potrebna za pobudjivanje bisolitona, i

$$m_B = 2m_{exc} + \frac{32\chi^4}{3RQ^2a^4v_0^2}\,, \qquad \text{(III 1.46)}$$

efektivna masa bisolitona.

Normirana talasna funkcija bisolitona ima oblik:

$$A(x,y;t)=\frac{a^3\Omega}{8\sqrt{2}}\;\frac{e^{i\kappa\frac{x+y}{2}-i\frac{E_B(\kappa)+E_g}{\hbar}t}}{ch\frac{a^2\Omega}{4}\xi\;ch\frac{a^2\Omega}{4}\eta}\;. \qquad \text{(III 1.47)}$$

Do sada smo pobudjenje sa energijom (III 1.44) nazivali bisolitonom ne proveravajući da li ono zaista predstavlja vezano stanje dva solitona.Iz fizičkih razloga je jasno da ako se dva solitona vežu u novo pobudjenje oni moraju da žrtvuju deo svoje energije da bi to novo pobudjenje bilo stabilno.Zbog toga energija bisolitona mora biti manja od sume energija dva slobodna solitona.Ovaj zahtev koji predstavlja uslov nastanka bisolitona napisaćemo kao:

$$G(\kappa)=2E_S(\kappa)-E_B(\kappa)\;>\;0\;. \qquad \text{(III 1.48)}$$

Ukoliko je $G(\kappa)$ pozitivna veličina,ona predstavlja energiju veze bisolitona.

Na osnovu rezultata paragrafa I 2., možemo pisati:

$$2E_S(\kappa)=2\Delta-4R-\frac{2\chi^4}{3RQ^2a^4}+m_S\,v_{SK}^2\;, \qquad \text{(III 1.49)}$$

gde je:

$$v_{SK}=\frac{2a^2R}{\hbar}\kappa=2v_{BK} \qquad \text{(III 1.50)}$$

i

$$m_S=m_{exc}+\frac{4\chi^4}{3RQ^2a^4v_0^2}\;. \qquad \text{(IIII 1.51)}$$

S obzirom na (III 1.44) i (III 1.49) dobijamo izraz za vezivnu energiju bisolitona:

$$G(K) = \frac{2\chi^4}{RQ^2 a^4} + \frac{3}{2} T_{exc} , \qquad \text{(III 1.52)}$$

gde je:

$$T_{exc} = \frac{1}{2} m_{exc} v_{eK}^2 , \quad v_{eK} = v_{sK} ,$$

kinetička energija eksitona.

Kao što se vidi iz dobijenog rezultata veličina G je pozitivna za sve vrednosti K ,pa prema tome pobudjenje sa energijom (III 1.44) zaista predstavlja vezano stanje dva solitona.

Napred je rečeno da bi strogo govoreći eksitonski hamiltonijan (III 1.7) i hamiltonijan eksiton-fonon interakcije (III 1.9) trebalo proširiti članovima četvrtog reda po eksitonskim operatorima,jer se bisolitonska stanja ispituju preko dvočestične eksitonske funkcije (III 1.1) koja ne postaje ravna nuli kada se na nju primene bozonske forme četvrtog reda u jednačini $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_2\rangle = H|\Psi_2\rangle$. Takodje je rečeno da popravke koje dolaze od članova četvrtog reda mogu da se odbace u analizi problema bisolitona.Ovde ćemo demonstrirati razlog zbog koga se one mogu odbaciti,držeći se analize iz /109/.

Ako se eksitonski hamiltonijan sistema napiše preko Pauli-operatora:

$$H_e^{(P)} = H_{oe} + \sum_n (\Delta + \sum_m D_{nm}) P_n^+ P_n - \sum_{nm} R_{nm} P_n^+ P_m -$$

$$- \sum_{nm} V_{nm} P_n^+ P_n P_m^+ P_m ,$$

(III 1.53)

uzme da $n \to n + u_n$ i $m \to m + u_m$,matrični elementi razviju sa tačnošću do prvog stepena pomeraja u_n i u_m ,iskoristi bozonska reprezentacija za Pauli-operatore /110/ :

$$P \approx B + B^+BB \quad , \quad P^+ \approx B^+ - B^+B^+B$$

i iskoristi aproksimacija najbližih suseda onda u formuli (III 1.7) :

$$H_e \to H_e + H_e^{(4)} \equiv H_e^{(2+4)} \qquad \text{(III 1.54)}$$

dok u formuli (III 1.9):

$$H_{ep} \to H_{ep} + H_{ep}^{(4)} \equiv H_{ep}^{(2+4)} \qquad \text{(III 1.55)}$$

Operatori $H_e^{(4)}$ i $H_{ep}^{(4)}$ dati su izrazima:

$$\begin{aligned} H_e^{(4)} = & - \Delta \sum_n B_n^{+2} B_n + R \sum_n B_n^{+2} B_n (B_{n+1} + B_{n-1}) + \\ & + R \sum_n (B_{n+1}^+ + B_{n-1}^+) B_n^+ B_n^2 - \\ & - V \sum_n B_n^+ B_n \left[B_{n+1}^+ B_{n+1} + B_{n-1}^+ B_{n-1} \right] \end{aligned} \qquad \text{(III 1.56)}$$

i

$$\begin{aligned} H_{ep}^{(4)} = & \; J_D \sum_n B_n^{+2} B_n^2 (u_{n+1} - u_{n-1}) - \\ & - J_R \sum_n B_n^{+2} B_n \left[B_{n+1} (u_{n+1} - u_n) + B_{n-1} (u_n - u_{n-1}) \right] - \\ & - J_R \sum_n \left[B_{n+1}^+ (u_{n+1} - u_n) + B_{n-1}^+ (u_n - u_{n-1}) \right] B_n^+ B_n^2 + \\ & + J_V \sum_n B_n^+ B_n \left[B_{n+1}^+ B_{n+1} (u_{n+1} - u_n) + B_{n-1}^+ B_{n-1} (u_n - u_{n-1}) \right] \end{aligned}$$

(III 1.57)

gde je:

$$J_V = N^{-1} \sum_k k V_k \sin ak \; . \qquad \text{(III 1.58)}$$

Šredingerova jednačina za funkciju $|\Psi_2\rangle$ može se napisati u obliku:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_2\rangle = H|\Psi_2\rangle + (H_e^{(4)} + H_{ep}^{(4)})|\Psi_2\rangle \,, \qquad \text{(III 1.59)}$$

gde je H dato sa (III 1.6).Na ovu jednačinu primeni se s leva operator $\langle O_e|\overset{*}{A}_{nm}B_m B_n$ i dobijena relacija,koja odredjuje koeficijente A_{nm} ,se piše u kontinualnoj aproksimaciji,pri čemu u ovoj aproksimaciji:

$$\begin{aligned} &\delta_{f,g} \to a\,\delta(x-y)\,, \\ &\delta_{f\pm 1,g} \to a\,\delta(x-y) \pm a\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-y) + O(a^3)\,, \\ &\delta_{f,g\pm 1} \to a\,\delta(x-y) \pm a\frac{\partial}{\partial y}\delta(x-y) + O(a^3)\,. \end{aligned} \qquad \text{(III 1.60)}$$

Zanemarujući članove proporcionalne a^3 dobijamo da je:

$$\langle O_e|B(x)B(y)(H_e^{(4)} + H_{ep}^{(4)})|\Psi_2\rangle \sim A(x,x)\,\delta(x-y)\,, \qquad \text{(III 1.61)}$$

dok nam $H|\Psi_2\rangle$ daje desnu stranu jednačine (III 1.15).

Kombinovana jednačina za fononske operatore usrednjena po $|\Psi_2\rangle|C_p\rangle$ i napisana u kontinualnoj aproksimaciji postaje:

$$\frac{\partial^2\beta}{\partial t^2} - v_0^2\frac{\partial^2\beta}{\partial x^2} = \frac{8\chi}{Ma}\frac{\partial}{\partial x}\int_{-\infty}^{+\infty} dy\,|A(x,y;t)|^2 + \langle\Psi_2|\langle C_p|H_{ep}^{(4)}|\Psi_2\rangle|C_p\rangle\,,$$

(III 1.62)

odnosno:

$$\frac{\partial^2\beta}{\partial t^2} - v_0^2\frac{\partial^2\beta}{\partial y^2} = \frac{8\chi}{Ma}\frac{\partial}{\partial y}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,|A(x,y;t)|^2 + \langle\Psi_2|\langle C_p|H_{ep}^{(4)}|\Psi_2\rangle|C_p\rangle\,,$$

(III 1.63)

pri čemu je:

$$< \Psi_2 | < C_p | H_{ep}^{(4)} | \Psi_2 > | C_p > \sim | A(x,x) |^2 . \qquad \text{(III 1.64)}$$

Kao što se vidi popravke od formi četvrtog reda (III 1.61) i (III 1.64) proporcionalne su dijagonalnom koeficijentu $A(x,x;t)$.

U radu /111/ detaljno je analiziran problem vezanih stanja na potpuno analogan način kao ovde i pokazano je da članovi proporcionalni koeficijentima A_{nm} koji figurišu u dvočestičnoj bozonskoj funkciji daju nefizička stanja sa energijom pobudjenja ravnom nuli. Zbog toga se ovakvi članovi odbacuju iz osnovne jednačine koja definiše energiju vezanih stanja i njihovu amplitudu. Rešenje preostalog dela osnovne jednačine daje korektan rezultat za energiju i amplitudu vezanih stanja koji su dobijeni i drugim metodama /108/.

Rukovodeći se rezultatima ovoga rada iz jednačina za $\frac{\partial A}{\partial t}$ i $\frac{\partial^2 B}{\partial t^2}$ dobijamo popravke proporcionalne dijagonalnim koeficijentima $A(x,x;t)$. Tada se ove jednačine svode na (III 1.15), (III 1.17) i (III 1.18) i daju rezultat (III 1.44) za energiju bisolitona i rezultat (III 1.47) za amplitudu bisolitona.

Fizički razlog za odbacivanje članova proporcionalnih $A(x,x)$ je jasan. Ovakvi članovi duguju svoje poreklo rasejanju dugih talasa na δ-potencijalu, a kao što je poznato /112/ ovakvo rasejanje ne daje doprinose ni energiji pobudjenja niti može da stvori vezano stanje. Na osnovu ovakvog rezonovanja u daljem ćemo vezano stanje analizirati sa hamiltonijanom koji je kvadratna forma po eksitonskim operatorima, ne uvodeći popravke četvrtog reda.

U skladu sa ovom diskusijom amplitudu (III 1.47) pisaćemo u obliku:

$$A(x,y,t) = \begin{cases} \dfrac{a^3\Omega}{8\sqrt{2}} \dfrac{e^{iK\frac{x+y}{2} - i\frac{E_b(K)+E_q}{\hbar}t}}{ch\frac{a^2\Omega}{4}\xi \, ch\frac{a^2\Omega}{4}\eta} ; & y \neq x \\ 0 ; & y = x \end{cases}$$

što znači da za $y=x$ koristimo trivijalno rešenje nelinearne Šredingerove jednačine.

III 2. BETEOVSKO RAZDVAJANJE ZONA I BISOLITONI

Uticaj beteovskog razdvajanja eksitonskih zona na bisolitonske karakteristike analiziraćemo koristeći rezultate paragrafa II 2..To znači da ćemo krenuti od ekvivalentnog hamiltonijana oblika:

$$\begin{aligned} H_{eq} = {} & \sum_{n\alpha} \tilde{\Delta}_\alpha B^+_{n\alpha} B_{n\alpha} - \sum_{n\alpha} \tilde{R}_\alpha (B^+_{n\alpha} B_{n+1,\alpha} + B^+_{n\alpha} B_{n-1,\alpha}) + \\ & + \sum_{n\alpha} \tilde{J}_{\alpha R} \left[B^+_{n\alpha} B_{n+1,\alpha} (u_{n+1} - u_n) + B^+_{n\alpha} B_{n-1,\alpha} (u_n - u_{n-1}) \right] - \\ & - \sum_{n\alpha} \tilde{J}_{\alpha D} B^+_{n\alpha} B_{n\alpha} (u_{n+1} - u_{n-1}) + \\ & + \sum_{n\alpha} (\overset{*}{g}{}^{\alpha\alpha}_{RD} B^+_{n\alpha} B_{n-1,\alpha} + g^{\alpha\alpha}_{RD} B^+_{n-1,\alpha} B_{n\alpha})(u_{n+1} - u_n) + \\ & + \sum_{n\alpha} (\overset{*}{g}{}^{\alpha\alpha}_{RD} B^+_{n\alpha} B_{n+1,\alpha} + g^{\alpha\alpha}_{RD} B^+_{n+1,\alpha} B_{n\alpha})(u_n - u_{n-1}) + \\ & + \sum_{n} \left[\frac{1}{2M} p_n^2 + \frac{Q}{2} (u_n - u_{n-1})^2 \right] , \end{aligned} \tag{III 2.1}$$

gde je:

$$\tilde{\Delta}_\alpha = \Delta_\alpha + 2D^{\alpha\alpha} + 4\sum_{\alpha'} \frac{|D^{\alpha\alpha'}|^2}{\Delta_\alpha - \Delta_{\alpha'}} , \qquad \tilde{R}_\alpha = R^{\alpha\alpha} + 4\sum_{\alpha'} \frac{Re(R^{\alpha\alpha'} D^{\alpha'\alpha})}{\Delta_\alpha - \Delta_{\alpha'}} ,$$

$$\tilde{J}_{\alpha R} = J_R^{\alpha\alpha} + 2\sum_{\alpha'} \frac{Re\,(R^{\alpha\alpha'} J_D^{\alpha\alpha'} + 2\, J_R^{\alpha\alpha'} D^{\alpha'\alpha})}{\Delta_\alpha - \Delta_{\alpha'}},$$

$$\tilde{J}_{\alpha D} = J_D^{\alpha\alpha} + 4\sum_{\alpha'} \frac{Re\,(D^{\alpha\alpha'} J_D^{\alpha'\alpha})}{\Delta_\alpha - \Delta_{\alpha'}}, \qquad g_{RD}^{\alpha\alpha} = \sum_{\alpha'} \frac{R^{\alpha\alpha'} J_D^{\alpha'\alpha}}{\Delta_\alpha - \Delta_{\alpha'}},$$

$$J_R^{\alpha\alpha'} = N^{-1}\sum_K K R^{\alpha\alpha'} \sin aK, \qquad J_D^{\alpha\alpha'} = N^{-1}\sum_K K D_K^{\alpha\alpha'} \sin aK,$$

$$\alpha\alpha' \in (1, 2, \ldots W). \qquad \text{(III 2.2)}$$

Iz razloga koji su navedeni u III 1. u hamiltonijanu (III 3.1) nisu uzete u obzir forme koje sadrže proizvode četiri eksitonska operatora.Analiza će se sastojati iz dva dela.U prvom delu biće analiziran bisoliton koji obrazuju dva eksitona tipa μ (vidi II 2.).Ovakav bisoliton se može obrazovati samo u slučaju ako je $\tilde{R}_\mu > 0$ .U drugom delu ovog paragrafa biće analiziran bisoliton koji obrazuju eksiton tipa μ i eksiton tipa ν ,pri čemu je $\nu \neq \mu$ .Ovakav bisoliton može se obrazovati ako su $\tilde{R}_\mu, \tilde{R}_\nu > 0$.

U analizi bisolitona tipa $\mu\mu$ krenućemo od talasne funkcije:

$$|\mu\mu\rangle = \sum_{fg} A_{fg}^{\mu\mu}(t)\, B_{\mu f}^{+} B_{\mu g}^{+} \,|0_e\rangle\,, \qquad \text{(III 2.3)}$$

u kojoj koeficijenti zadovoljavaju relaciju:

$$A_{fg}^{\mu\mu}(t) = A_{gf}^{\mu\mu}(t)\,. \qquad \text{(III 2.4)}$$

Iz uslova normiranja $\langle\mu\mu\,|\,\mu\mu\rangle = 1$,sledi uslov normiranja za koeficijente:

$$\sum_{fg} |A_{fg}^{\mu\mu}|^2 = \frac{1}{2}\,. \qquad \text{(III 2.5)}$$

Ponavljajući proceduru opisanu u III 1. za odredjivanje koeficijenata $A^{\mu\mu}$ kao i deformacija β, dobijamo sledeći sistem jednačina:

$$i\hbar \frac{\partial A^{\mu\mu}}{\partial t} = (C_{\mu\mu} + 2\tilde{\Delta}_{\mu} - 4\tilde{R}_{\mu})A^{\mu\mu} - a^2 R_{\mu}\left(\frac{\partial^2 A^{\mu\mu}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A^{\mu\mu}}{\partial y^2}\right) + + 2\chi_{\mu} A^{\mu\mu}\left(\frac{\partial \beta}{\partial x} + \frac{\partial \beta}{\partial y}\right), \tag{III 2.6}$$

$$\frac{\partial^2 \beta}{\partial t^2} - v_0^2 \frac{\partial^2 \beta}{\partial x^2} = \frac{8\chi_{\mu}}{aM} \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \, |A^{\mu\mu}|^2, \tag{III 2.7}$$

$$\frac{\partial^2 \beta}{\partial t^2} - v_0^2 \frac{\partial^2 \beta}{\partial y^2} = \frac{8\chi_{\mu}}{aM} \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, |A^{\mu\mu}|^2, \tag{III 2.8}$$

gde je:

$$\chi_{\mu} = a(\tilde{J}_{R\mu} - \tilde{J}_{D\mu} + g_{RD}^{\mu\mu} + \overset{*}{g}{}_{RD}^{\mu\mu}), \tag{III 2.9}$$

$$v_0^2 = a^2 \frac{Q}{M} \tag{III 2.10}$$

i

$$C_{\mu\mu} = \frac{1}{4a}\left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[M\left(\frac{\partial \beta}{\partial t}\right)^2 + Qa^2\left(\frac{\partial \beta}{\partial x}\right)^2 \right] + + \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left[M\left(\frac{\partial \beta}{\partial t}\right)^2 + Qa^2\left(\frac{\partial \beta}{\partial y}\right)^2 \right] \right\}. \tag{III 2.11}$$

Uslov normiranja (III 2.5) u kontinualnoj aproksimaciji glasi:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,dy \, |A^{\mu\mu}|^2 = \frac{a^2}{2}. \tag{III 2.12}$$

Rešenje sistema jednačina (III 2.6) - (III 2.8) potražićemo u obliku:

$$A^{\mu\mu}(x,y;t) = f_{1\mu}(\xi)\, f_{2\mu}(\eta)\, e^{ik\frac{x+y}{2} - i\omega t} ,$$

$$\xi = x - v_\mu t , \quad \eta = y = v_\mu t , \quad \overset{*}{f}_{1\mu} = f_{1\mu} , \tag{III 2.13}$$

$$\overset{*}{f}_{2\mu} = f_{2\mu} , \quad \beta(x,t) \to \beta_\mu(\xi) , \quad \beta(y,t) \to \beta_\mu(\eta) , \quad x \neq y .$$

S obzirom na (III 2.13) jednačina (III 2.6) postaje:

$$\frac{f''_{1\mu}}{f_{1\mu}} + \frac{f''_{2\mu}}{f_{2\mu}} = \frac{C_{\mu\mu} + 2\tilde{\Delta}_\mu - 4\tilde{R}_\mu + \frac{1}{2}a^2 k^2 \tilde{R}_\mu - E}{a^2 \tilde{R}_\mu} + \frac{2\chi_\mu}{a^2 \tilde{R}_\mu}\left(\frac{\partial \beta_\mu}{\partial \xi} + \frac{\partial \beta_\mu}{\partial \eta}\right) ,$$

$$E = \hbar\omega , \quad v_\mu = \frac{a^2 \tilde{R}_\mu}{\hbar} k \tag{III 2.14}$$

dok se (III 2.7) i (III 2.8),respektivno, svode na:

$$\frac{d^2\beta_\mu}{d\xi^2} = -\frac{8\chi_\mu \mathcal{D}_2}{M(v_0^2 - v_\mu^2)} f_{1\mu}^2(\xi) , \qquad \mathcal{D}_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta\, f_{2\mu}^2(\eta)$$

$$\frac{d\beta_\mu}{d\xi} = -\frac{8\chi_\mu \mathcal{D}_2}{M(v_0^2 - v_\mu^2)} f_{1\mu}^2 , \tag{III 2.15}$$

$$\frac{d^2\beta_\mu}{d\eta^2} = -\frac{8\chi_\mu \mathcal{D}_1}{M(v_0^2 - v_\mu^2)} f_{2\mu}^2(\eta) , \qquad \mathcal{D}_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, f_{1\mu}^2(\xi)$$

$$\frac{d\beta_\mu}{d\eta} = -\frac{8\chi_\mu \mathcal{D}_1}{M(v_0^2 - v_\mu^2)} f_{2\mu}^2 . \tag{III 2.16}$$

Zamenom (III 2.15) i (III 2.16) u (III 2.14), posle razdvajanja promenljivih, dolazimo do jednačina:

$$\frac{d^2 f_{1\mu}}{d\xi^2} = \left(\frac{\Theta_\mu}{2} + F\right) f_{1\mu} - 2\Omega_\mu \mathcal{D}_2 f_{1\mu}^3 = 0 \quad ,$$
$$\frac{d^2 f_{2\mu}}{d\eta^2} = \left(\frac{\Theta_\mu}{2} - F\right) f_{2\mu} - 2\Omega_\mu \mathcal{D}_1 f_{2\mu}^3 = 0 \quad , \qquad \text{(III 2.17)}$$

gde je:

$$\Theta_\mu(\kappa, E) = \frac{C_{\mu\mu} + 2\tilde{\Delta}_\mu - 4\tilde{R}_\mu + 1/2\, a^2\kappa^2\hat{R}_\mu - E}{a^2\tilde{R}_\mu}, \qquad \text{(III 2.18)}$$

$$\Omega_\mu(\kappa) = \frac{8\chi_\mu^2}{a^3\hat{R}_\mu M(v_0^2 - v_\mu^2)} \quad , \qquad \text{(III 2.19)}$$

i veličina F je parametar razdvajanja promenljivih.

Iz (III 2.17) nalazimo:

$$f_{1\mu}(\xi) = \sqrt{\frac{\frac{\Theta_\mu}{2} + F}{\Omega_\mu \mathcal{D}_2}}\;\frac{1}{ch\,\xi\sqrt{\frac{\Theta_\mu}{2} + F}} \quad , \qquad \text{(III 2.20)}$$

$$f_{2\mu}(\eta) = \sqrt{\frac{\frac{\Theta_\mu}{2} - F}{\Omega_\mu \mathcal{D}_1}}\;\frac{1}{ch\,\eta\sqrt{\frac{\Theta_\mu}{2} - F}} \quad . \qquad \text{(III 2.21)}$$

Zamenom (III 2.20) i (III 2.21) u izrazima za $\mathcal{D}_1$ i $\mathcal{D}_2$ dolazimo do zaključka da je:

$$F = 0 \qquad \text{(III 2.22)}$$

i

$$\alpha_1 \alpha_2 = \frac{1}{\sqrt{Z_\mu}} \sqrt{2\Theta_\mu} \, . \qquad \text{(III 2.23)}$$

Izrazi za deformaciju rešetke postaju:

$$\frac{\partial\beta}{\partial\zeta} = -\frac{4\chi_\mu \Theta_\mu}{\sqrt{Z_\mu} M(v_0^2 - v_\mu^2)} \, \frac{1}{a} \, \frac{1}{ch^2\zeta \sqrt{\frac{\Theta_\mu}{2}}} \, , \qquad \text{(III 2.24)}$$

$$\frac{\partial\beta}{\partial\eta} = -\frac{4\chi_\mu \Theta_\mu}{\sqrt{Z_\mu} M(v_0^2 - v_\mu^2)} \, \frac{1}{a} \, \frac{1}{ch^2\eta \sqrt{\frac{\Theta_\mu}{2}}} \, , \qquad \text{(III 2.25)}$$

i pomoću njih se odredjuje:

$$C_{\mu\mu} = \frac{16}{3} \, \frac{1+\nu_\mu^2}{1-\nu_\mu^2} \, \frac{\chi_\mu^4}{\tilde{R}_\mu M^2 v_0^4 (1-\nu_\mu^2)^2} \, , \quad \nu_\mu = \frac{v_\mu}{v_0} \, . \qquad \text{(III 2.26)}$$

S obzirom na ovo i uslov normiranja $\int_{-\infty}^{+\infty} d\zeta \, d\eta \, f_{1\mu}^2(\zeta) \, f_{2\mu}^2(\eta) = \frac{a^2}{2}$, nalazimo energiju bisolitona tipa $\mu\mu$:

$$E_{\mu\mu}(\kappa) = 2\tilde{\Delta}_\mu - 4\tilde{R}_\mu + \frac{1}{2}\tilde{R}_\mu a^2 \kappa^2 - \frac{8\chi_\mu^4}{\tilde{R}_\mu M^2 v_0^4 (1-\nu_{\mu\kappa}^2)^2} \left(1 - \frac{2}{3} \, \frac{1+\nu_{\mu\kappa}^2}{1-\nu_{\mu\kappa}^2}\right) .$$

(III 2.27)

Normirana amplituda ima oblik:

$$A^{\mu\mu}(x,y;t) = \frac{a^3\sqrt{Z_\mu}}{8\sqrt{2}} \, \frac{e^{i\kappa\frac{x+y}{2} - i\frac{E_{\mu\mu}(\kappa)}{\hbar} t}}{ch \frac{a^2\sqrt{Z_\mu}}{4}\zeta \; ch \frac{a^2\sqrt{Z_\mu}}{4}\eta} \, , \qquad x \neq y \, . \qquad \text{(III 2.28)}$$

Lako se može pokazati da je energija $E_{\mu\mu}(\kappa)$ manja od $2E_\mu(\kappa)$ gde je $E_\mu(\kappa)$ data formulom (II 2.24).

Sada možemo razmatrati slučaj kada eksiton tipa μ i eksiton tipa ν ($\nu \neq \mu$) obrazuju bi-soliton tipa $\mu\nu$ .Kao što je ranije rečeno to je moguće ako su $\tilde{R}_\mu, \tilde{R}_\nu > 0$.

Dvočestičnu eksitonsku talasnu funkciju zapisaćemo u simetrizovanoj formi:

$$|\mu\nu\rangle = \sum_{fg} A_{fg}^{\mu\nu}(t)\left(B_{f\mu}^{+} B_{g\nu}^{+} + B_{f\nu}^{+} B_{g\mu}^{+}\right)|0_e\rangle \,, \qquad \text{(III 2.29)}$$

gde koeficijenti A zadovoljavaju sledeće simetrijske relacije:

$$A_{fg}^{\mu\nu}(t) = A_{gf}^{\mu\nu}(t) \,, \qquad A_{fg}^{\mu\nu}(t) = A_{fg}^{\nu\mu}(t) \,. \qquad \text{(III 2.30)}$$

Iz uslova normiranja $\langle\mu\nu|\mu\nu\rangle = 1$,sledi uslov normiranja za koeficijente:

$$\sum_{fg} |A_{fg}^{\mu\nu}(t)| = \frac{1}{4} \,. \qquad \text{(III 2.31)}$$

Procedurom opisanom u III 1. dolazimo do sledećeg sistema jednačina za odredjivanje koeficijenata $A^{\mu\nu}$ i deformacija rešetke β :

$$i\hbar \frac{\partial A^{\mu\nu}}{\partial t} = (C_{\mu\nu} + \tilde{\Delta}_\mu + \tilde{\Delta}_\nu - 2\tilde{R}_\mu - 2\tilde{R}_\nu)A^{\mu\nu} -$$
$$- \frac{1}{2}a^2(\tilde{R}_\mu + \tilde{R}_\nu)\left(\frac{\partial^2 A^{\mu\nu}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A^{\mu\nu}}{\partial y^2}\right) + (\chi_\mu + \chi_\nu)A^{\mu\nu}\left(\frac{\partial\beta}{\partial x} + \frac{\partial\beta}{\partial y}\right), \qquad \text{(III 2.32)}$$

$$\frac{\partial^2\beta}{\partial t^2} - v_0^2 \frac{\partial^2\beta}{\partial x^2} = \frac{8(\chi_\mu + \chi_\nu)}{aM} \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} dy\, |A^{\mu\nu}|^2 , \qquad \text{(III 2.33)}$$

$$\frac{\partial^2\beta}{\partial t^2} - v_0^2 \frac{\partial^2\beta}{\partial y^2} = \frac{8(\chi_\mu + \chi_\nu)}{aM} \frac{\partial}{\partial y} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, |A^{\mu\nu}|^2 . \qquad \text{(III 2.34)}$$

U ovim jednačinama upotrebljene su sledeće oznake:

$$\chi_\mu = a(\tilde{J}_{R\mu} - \tilde{J}_{D\mu} + g_{RD}^{\mu\mu} + \overset{*}{g}{}_{RD}^{\mu\mu}) , \quad \chi_\nu = a(\tilde{J}_{R\nu} - \tilde{J}_D + g_{RD}^{\nu\nu} + \overset{*}{g}{}^{\nu\nu}$$

i (III 2.35)

$$C_{\mu\nu} = \frac{1}{4a} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[M\left(\frac{\partial\beta}{\partial t}\right)^2 + Qa^2\left(\frac{\partial\beta}{\partial x}\right)^2 \right] + \right. \qquad \text{(III 2.36)}$$

$$\left. + \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left[M\left(\frac{\partial\beta}{\partial t}\right)^2 + Qa^2\left(\frac{\partial\beta}{\partial y}\right)^2 \right] \right\} .$$

Uslov normiranja koeficijenata u kontinuumu glasi:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, dy \, |A^{\mu\nu}_{(x,y;t)}|^2 = \frac{a^2}{4} . \qquad \text{(III 2.37)}$$

Rešenje sistema jednačina (III 2.32)-(III 2.34) tražićemo u obliku:

$$A^{\mu\nu}_{(x,y;t)} = f_1(\xi)\, f_2(\eta)\, e^{i\kappa(\rho_\mu x + \rho_\nu y) - i\omega t}$$

$$\xi = x - v_1 t , \quad \eta = y - v_2 t , \quad \overset{*}{f}_1 = f_1 , \quad \overset{*}{f}_2 = f_2 , \qquad \text{(III 2.38)}$$

$$\beta(x,t) \to \beta(\xi) , \quad \beta(y,t) \to \beta(\eta) , \quad x \neq y .$$

gde je:

$$\rho_\mu = \frac{m_\mu}{m_\mu + m_\nu} , \quad \rho_\nu = \frac{m_\nu}{m_\mu + m_\nu} , \quad m_\mu = \frac{\hbar^2}{2\tilde{R}_\mu a^2} , \quad m_\nu = \frac{\hbar^2}{2\tilde{R}_\mu a^2} .$$

(III 2.39)

Pošto m_μ i m_ν predstavljaju,respektivno, efektivne mase eksitona tipa μ i ν ,očigledno je da koordinata koja množi κ u izrazu za $A^{\mu\nu}$ predstavlja koordinatu centra mase eksitona tipa μ i eksitona tipa ν .

Na osnovu (III 2.38) sistem jednačina (III 2.32)-(III 2.34) prelazi u sistem običnih diferencijalnih jednačina:

$$\frac{f_1''}{f_1}+\frac{f_2''}{f_2}=\frac{C_{\mu\nu}+\tilde{\Delta}_\mu+\tilde{\Delta}_\nu-2\tilde{R}_\mu-2\tilde{R}_\nu+1/2\,a^2\kappa^2(\tilde{R}_\mu+\tilde{R}_\nu)(\varrho_\mu^2+\varrho_\nu^2)-E}{1/2\,a^2(\tilde{R}_\mu+\tilde{R}_\nu)}+$$

$$+\frac{\chi_\mu+\chi_\nu}{1/2\,a^2(\tilde{R}_\mu+\tilde{R}_\nu)}\left(\frac{d\beta}{d\xi}+\frac{d\beta}{d\eta}\right), \qquad E=\hbar\omega,$$

(III 2.40)

$$\frac{d^2\beta_\mu}{d\xi^2}=-\frac{8(\chi_\mu+\chi_\nu)\,\mathcal{D}_\nu}{aM(v_0^2-v_{\mu\kappa}^2)}\,\frac{d}{d\xi}\,f_1^2,$$

$$\frac{d\beta_\mu}{d\xi}=-\frac{8(\chi_\mu+\chi_\nu)\,\mathcal{D}_\nu}{aM(v_0^2-v_{\mu\kappa}^2)}\,f_1^2, \qquad \mathcal{D}_\nu=\int_{-\infty}^{+\infty}d\eta\,f_2^2(\eta),$$

(III 2.41)

$$\frac{d^2\beta_\nu}{d\eta^2}=-\frac{8(\chi_\mu+\chi_\nu)\,\mathcal{D}_\mu}{aM(v_0^2-v_{\nu\kappa}^2)}\,\frac{d}{d\eta}\,f_2^2,$$

$$\frac{d\beta_\nu}{d\eta}=-\frac{8(\chi_\mu+\chi_\nu)\,\mathcal{D}_\mu}{aM(v_0^2-v_{\nu\kappa}^2)}\,f_2, \qquad \mathcal{D}_\mu=\int_{-\infty}^{+\infty}d\xi\,f_1^2(\xi)$$

(III 2.42)

pri čemu je:

$$\vartheta_1 \equiv \vartheta_{\mu K} = \frac{a^2 \varsigma_\mu (\widetilde{R}_\mu + \widetilde{R}_\nu)}{\hbar} K \quad , \quad \vartheta_2 \equiv \vartheta_{\nu K} = \frac{a^2 \varsigma_\nu (\widehat{R}_\mu + \widehat{R}_\nu)}{\hbar} K \, . \qquad \text{(III 2.43)}$$

Zamenom (III 2.41) i (III 2.42) u (III 2.40) dolazimo do jednačine:

$$\frac{f_1''}{f_1} + \frac{f_2''}{f_2} = \Theta_{\mu\nu}(K,E) - 2\widetilde{\Omega}_\mu(K)\mathcal{D}_\nu f_1^2 - 2\widetilde{\Omega}_\nu(K)\mathcal{D}_\mu f_2^2 \, , \qquad \text{(III 2.44)}$$

gde je :

$$\Theta_{\mu\nu}(K,E) = \frac{C_{\mu\nu} + \widehat{\Delta}_\mu + \widetilde{\Delta}_\nu - 2\widetilde{R}_\mu - 2\widetilde{R}_\nu + 1/2(\widetilde{R}_\mu + \widetilde{R}_\nu)(\varsigma_\mu^2 + \varsigma_\nu^2)a^2K^2 - E}{1/2(\widetilde{R}_\mu + \widetilde{R}_\nu)a^2} \, , \qquad \text{(III 2.45)}$$

$$\widetilde{\Omega}_\mu(K) = \frac{4(\chi_\mu + \chi_\nu)^2}{1/2\, a^3 M(\widetilde{R}_\mu + \widetilde{R}_\nu)(\vartheta_0^2 - \vartheta_{\mu K}^2)} \, , \qquad \text{(III 2.46)}$$

$$\widetilde{\Omega}_\nu(K) = \frac{4(\chi_\mu + \chi_\nu)^2}{1/2\, a^3 M(\widetilde{R}_\mu + R_\nu)(\vartheta_0^2 - \vartheta_{\nu K}^2)} \, . \qquad \text{(III 2.47)}$$

Posle razdvajanja promenljivih (III 2.44) se svodi na:

$$\frac{d^2 f_1}{d\xi} = \left(\frac{\Theta_{\mu\nu}}{2} + \Lambda\right) f_1 - 2\widetilde{\Omega}_\mu \mathcal{D}_\nu f_1^3 = 0 \, , \qquad \text{(III 2.48)}$$

$$\frac{d^2 f_2}{d\eta} = \left(\frac{\Theta_{\mu\nu}}{2} - \Lambda\right) f_2 - 2\widetilde{\Omega}_\nu \mathcal{D}_\mu f_2^3 = 0 \, ,$$

gde je Λ parametar razdvajanja promenljivih. Iz (III 2.48) sledi:

$$f_1(\xi)=\sqrt{\frac{\frac{\Theta_{\mu\nu}}{2}+\Lambda}{\tilde{\Omega}_\mu \, \alpha_\nu}}\;\frac{1}{ch\, \xi\sqrt{\frac{\Theta_{\mu\nu}}{2}+\Lambda}}\,, \tag{III 2.49}$$

$$f_2(\eta)=\sqrt{\frac{\frac{\Theta_{\mu\nu}}{2}-\Lambda}{\tilde{\Omega}_\nu \, \alpha_\mu}}\;\frac{1}{ch\, \eta\sqrt{\frac{\Theta_{\mu\nu}}{2}-\Lambda}}\,. \tag{III 2.50}$$

Zamenom f_1 i f_2 u izrazima za α_μ i α_ν nalazimo:

$$\Lambda=\frac{\Theta_{\mu\nu}}{2}\;\frac{\tilde{\Omega}_\mu^2-\tilde{\Omega}_\nu^2}{\tilde{\Omega}_\mu^2+\tilde{\Omega}_\nu^2}\,, \tag{III 2.51}$$

$$\alpha_\mu \alpha_\nu = 2\sqrt{\frac{\Theta_{\mu\nu}}{\tilde{\Omega}_\mu^2+\tilde{\Omega}_\nu^2}}\,. \tag{III 2.52}$$

S obzirom na ovo sledi:

$$f_1(\xi)=\sqrt{\frac{\Theta_{\mu\nu}\,\tilde{\Omega}_\mu}{\alpha_\nu(\tilde{\Omega}_\mu^2+\tilde{\Omega}_\nu^2)}}\;\frac{1}{ch\,\xi\,\tilde{\Omega}_\mu\sqrt{\frac{\Theta_{\mu\nu}}{\tilde{\Omega}_\mu^2+\tilde{\Omega}_\nu^2}}}\,, \tag{III 2.53}$$

$$f_2(\eta)=\sqrt{\frac{\Theta_{\mu\nu}\,\tilde{\Omega}_\nu}{\alpha_\mu(\tilde{\Omega}_\mu^2+\tilde{\Omega}_\nu^2)}}\;\frac{1}{ch\,\eta\,\tilde{\Omega}_\nu\sqrt{\frac{\Theta_{\mu\nu}}{\tilde{\Omega}_\mu^2+\tilde{\Omega}_\nu^2}}}\,, \tag{III 2.54}$$

dok su deformacije rešetke date sa:

$$\frac{d\beta_\mu}{d\zeta} = -\frac{8(\chi_\mu+\chi_\nu)\,\Theta_{\mu\nu}\,\tilde{\Omega}_\mu}{aM(\tilde{\Omega}_\mu^2+\tilde{\Omega}_\nu^2)(v_0^2-v_{\mu K}^2)}\;\frac{1}{ch^2\zeta\,\tilde{\Omega}_\mu\sqrt{\dfrac{\Theta_{\mu\nu}}{\tilde{\Omega}_\mu^2+\tilde{\Omega}_\nu^2}}}$$

(III 2.55)

$$\frac{d\beta_\nu}{d\eta} = -\frac{8(\chi_\mu+\chi_\nu)\,\Theta_{\mu\nu}\,\tilde{\Omega}_\nu}{aM(\tilde{\Omega}_\mu^2+\tilde{\Omega}_\nu^2)(v_0^2-v_{\nu K}^2)}\;\frac{1}{ch^2\eta\,\tilde{\Omega}_\nu\sqrt{\dfrac{\Theta_{\mu\nu}}{\tilde{\Omega}_\mu^2+\tilde{\Omega}_\nu^2}}}$$

(III 2.56)

Na osnovu poslednje dve formule može se naći energija deformacije rešetke:

$$C_{\mu\nu} = \frac{1}{3}\,\frac{(\chi_\mu+\chi_\nu)^4}{(\tilde{R}_\mu+\tilde{R}_\nu)M^2}\left[\frac{1}{(v_0^2-v_{\mu K}^2)^2}\,\frac{v_0^2+v_{\mu K}^2}{v_0^2-v_{\mu K}^2} + \frac{1}{(v_0^2-v_{\nu K}^2)^2}\,\frac{v_0^2+v_{\nu K}^2}{v_0^2-v_{\nu K}^2}\right]$$

(III 2.57)

Iz uslova normiranja za koeficijente $A^{\mu\nu}$ nalazimo energiju bisolitona tipa $\mu\nu$:

$$E_{\mu\nu}(K) = \tilde{\Delta}_\mu + \tilde{\Delta}_\nu - 2\tilde{R}_\mu - 2\tilde{R}_\nu + \frac{1}{2}(\tilde{R}_\mu+\tilde{R}_\nu)(\rho_\mu^2+\rho_\nu^2)a^2K^2 -$$

$$-\frac{(\chi_\mu+\chi_\nu)^4}{2(\tilde{R}_\mu+\tilde{R}_\nu)M^2}\left[\frac{1}{v_0^2-v_{\mu K}^2}\left(1-\frac{2}{3}\,\frac{v_0^2+v_{\mu K}^2}{v_0^2-v_{\mu K}^2}\right) + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{v_0^2-v_{\nu K}^2}\left(1-\frac{2}{3}\,\frac{v_0^2+v_{\nu K}^2}{v_0^2-v_{\nu K}^2}\right)\right].$$

(III 2.58)

Normirane bisolitonske amplitude date su formulom:

$$A^{\mu\nu}_{(x,y;t)} = \frac{a^3(\tilde{\Omega}_\mu \tilde{\Omega}_\nu)^{1/2}}{32} \frac{e^{i\kappa(\rho_\mu x + \rho_\nu y) - i\frac{E_{\mu\nu}(\kappa)}{\hbar}t}}{ch\frac{a^2\tilde{\Omega}_\mu}{8}(x - v_{\mu\kappa}t)\, ch\frac{a^2\tilde{\Omega}_\nu}{8}(y - v_{\nu\kappa}t)}.$$

$$x \neq y \qquad \text{(III 2.59)}$$

Kao i ranije lako se može pokazati da je $E_{\mu\nu}(\kappa) < E_\mu(\kappa) + E_\nu(\kappa)$,tako da dobijeni talasni paket zaista predstavlja vezano stanje dva eksitona različitog tipa.

Zaključujući analize ovog paragrafa možemo konstatovati da u molekulskom kristalu u kome je prisutno beteovsko razdvajanje eksitonskih zona,bisolitone mogu da obrazuju i eksitoni istog tipa i eksitoni dva različita tipa.

III 3. PROBLEM FUZIJE DVA SLOBODNA SOLITONA U BISOLITON

Ovde ćemo analizirati verovatnoću fuzije dva slobodna solitona u bisoliton. Analize u III 1. pokazale su da bisoliton sa impulsom $\hbar K$ ima za svako K nižu energiju nego dva slobodna solitona sa impulsima $\hbar K$. To drugim rečima znači da se dva slobodna solitona od kojih svaki ima talasni vektor K ne mogu spontano fuzionisati u bisoliton sa talasnim vektorom K. Pošto vezivna energija bisolitona zavisi od impulsa očigledno je da do spontane fuzije dva solitona u bisoliton može da dodje pri nekoj drugoj (u odnosu na navedenu) zavisnosti impulsa. Da bismo razmatranje uopštili analiziraćemo verovatnoću fuzije dva solitona u bisoliton pod dejstvom nekog spoljašnjeg polja. Iz ovih analiza lako se može izvesti zaključak i o mogućnosti spontane fuzije.

Prema /2/ spoljašnje polje koje menja karakter solitona nastaje kao rezultat spoljašnjih sila koje deformišu rešetku. Ovakvo polje nije homogeno i lokalnog je karaktera, što znači da se može predstaviti u obliku $V = V(x)$. Za potrebe pomenute analize mi ćemo predpostaviti da se spoljašnje polje periodično menja u vremenu i da i amplituda i faza slabo zavise od koordinate. Drugim rečima spoljašnje polje ćemo predstaviti u obliku:

$$V(x) \approx W e^{it\Omega} + \overset{*}{W} e^{-it\Omega} , \qquad \overset{*}{W} = W . \tag{III 3.1}$$

Ovu aproksimaciju koristimo zato što nam je cilj da dobijemo kvantitativne rezultate o mogićnosti fuzije dva solitona u bisoliton. Svaki kvantitativni rezultat bi zahtevao da se uzme u obzir zavisnost veličina W i Ω od x ,ali je očigledno,pošto se radi o spolja nametnutom polju sila,da ova zavisnost,od slučaja do slučaja,može da bude veoma različita. Iz procedure koja će biti u daljem izložena biće jasno da se analize,bez principijelnih teškoća,mogu uopštiti i na slučaj kada W i Ω zavise od x .

Razmotrimo verovatnoću fuzije dva slobodna solitona u bisoliton pod dejstvom interakcije (III 3.1) Posmatraćemo proces u kome pod dejstvom interakcije $V(x)$ na mestima x_1 i x_2 u trenutku t iščeznu dva slobodna solitona čije su amplitude,respektivno:

$$\overset{*}{A}_S(k_1, x_1, t) = \frac{a\Omega_{sk_1}^{1/2}}{2} \frac{e^{-ik_1x_1 + i\omega_{sk_1}t}}{ch\,\frac{a\Omega_{sk_1}}{2}(x_1 - v_{sk_1}t)} ,$$

$$\Omega_{sk_1} = \frac{2\chi^2}{a^2RM(v_0^2 - v_{sk_1}^2)} , \tag{III 3.2}$$

$$\omega_{sk_1} = \frac{1}{\hbar}\left(\Delta - 2R - \frac{\chi^4}{3RQ^2a^4} + \frac{1}{2} m_s v_{sk_1}^2\right) ,$$

$$m_s = m_{exc} + \frac{4\chi^4}{3RQ^2a^4v_0^2} , \quad m_{exc} = \frac{\hbar^2}{2Ra^2} , \quad v_{sk_1} = \frac{2a^2R}{\hbar} k_1 ,$$

i

$$\overset{*}{A}_S(K_2,x_2,t)=\frac{a\,\Omega_{SK_2}^{1/2}}{2}\,\frac{e^{-iK_2x_2+i\omega_{SK_2}t}}{ch\,\frac{a\,\Omega_{SK_2}}{2}(x_2-v_{SK_2}t)}\,, \qquad \text{(III 3.3)}$$

i stvori se bisoliton,čiji je centar mase u tački $\frac{x_1+x_2}{2}$ sa amplitudom:

$$A_B(K,x_1,x_2,t)=\frac{a^3\Omega_{BK}}{8\sqrt{2}}\,\frac{e^{iK\frac{x_1+x_2}{2}-i\omega_{BK}t}}{ch\,\frac{a^2\Omega_{BK}}{4}(x_1-v_{BK}t)\,ch\,\frac{a^2\Omega_{BK}}{4}(x_2-v_{BK}t)}\,,$$

$$\Omega_{BK}=\frac{8\chi^2}{a^3RM(v_0^2-v_{BK}^2)}\,,\qquad v_{BK}=\frac{a^2R}{\hbar}K=\frac{1}{2}v_{SK}\,, \qquad \text{(III 3.4)}$$

$$\omega_{BK}=\frac{1}{\hbar}\left(2\Delta-4R-\frac{8\chi^4}{3RQ^2a^4}+\frac{1}{2}m_B v_{BK}^2\right),\quad m_B=2m_{exc}+\frac{32\chi^4}{3RQ^2a^4v_0^2}\,,$$

$$x_2\neq x_1\,.$$

Na osnovu nestacionarne teorije perturbacija /113,114/,ako se interakcija (III 3.1)uključi u trenutku $t=0$ i isključi u trenutku $T>0$,amplitudu verovatnoće prelaska dva solitona u bisoliton po isteku vremena T možemo predstaviti u obliku:

$$\alpha^{\pm}(T)=\frac{W}{i\hbar}\int_0^T dt\,e^{\pm it\Omega}M_{if}(K_1,K,t)\,, \qquad \text{(III 3.5)}$$

gde je:

$$M_{if}(K_1,K,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}dx_1dx_2\,\overset{*}{A}_S(K_1,x_1,t)\overset{*}{A}_S(K_2,x_2,t)A_B(K,x_1,x_2,t)\,\times$$
$$\times\,\langle 0_e|B(x_2)B(x_1)B^+(x_1)B^+(x_2)|0_e\rangle=$$
$$=\frac{a^3\Omega_{SK_1}^{1/2}\,\Omega_{SK_2}^{1/2}\,\Omega_{BK}}{32\sqrt{2}}\,e^{-it(\omega_{BK}-\omega_{SK_1}-\omega_{SK_2})}I(K_1,K,t)\,I(K_2,K,t)\,;\quad x_2\neq x_1$$

$$\text{(III 3.6)}$$

i

$$I(\mu,\nu,t)=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}dx\,\frac{e^{ix\frac{\nu-2\mu}{2}}}{ch\frac{a\Omega_{S\mu}}{2}(x-v_{S\mu}t)\,ch\frac{a^2\Omega_{B\nu}}{4}(x-v_{B\nu}t)}\,. \tag{III 3.7}$$

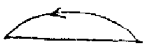
Ovde ćemo izdvojiti nešto prostora za rešavanje integrala (III 3.7) jer se takav tip u matematičkim priručnicima na žalost ne navodi, a očigledno je da se u teoriji solitonskih procesa veoma često može pojaviti.

Posmatraćemo konturni integral:

$$J_L(\mu,\nu,t)=\oint\limits_L dz\,\frac{e^{iz\frac{\nu-2\mu}{2}}}{ch\,\phi_\mu(z-v_{S\mu}t)\,ch\,\Lambda_\nu(z-v_{B\nu}t)} \tag{III 3.8}$$

$$\phi_{-\mu}=\phi_\mu=\frac{a\Omega_{S\mu}}{2},\quad \Lambda_{-\nu}=\Lambda_\nu=\frac{a^2\Omega_{B\nu}}{4},\quad v_{S,-\mu}=-v_{S,\mu},\quad v_{B,-\nu}=v_{B,\nu}\,.$$

Za $\nu-2\mu>0$ konturu zatvaramo u gornjoj poluravni, tj.

$$L\to L^{(+)}=$$  ,

i tada je:

$$I(\mu,\nu,t)=2\pi i\Big(\sum_{\substack{n=0\\ z=z_n(\phi_\mu)}}^{\infty}Res\,f(z)+\sum_{\substack{n=0\\ z=z_n(\Lambda_\nu)}}^{\infty}Res\,f(z)\Big)\,, \tag{III 3.9}$$

$$f(z)=\frac{e^{iz\frac{\nu-2\mu}{2}}}{ch\,\phi_\mu(z-v_{S\mu}t)\,ch\,\Lambda_\nu(z-v_{B\nu}t)}\,,$$

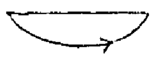
$$z_n(\phi_\mu)=v_{S\mu}t+i(2n+1)\frac{\pi}{2\phi_\mu}\,,\quad z_n(\Lambda_\nu)=v_{B\nu}t+i(2n+1)\frac{\pi}{2\Lambda_\nu}\,.$$

Navedeni reziduumi se izračunavaju primenom Lopitalove teoreme i vrednosti su im:

$$\operatorname*{Res}_{z = z_n(\phi_\mu)} f(z) = \frac{e^{-\frac{(\nu-2\mu)\pi}{4\phi_\mu} + i\frac{(\nu-2\mu)\vartheta_{S\mu} t}{2}} (-1)^n e^{-\frac{(\nu-2\mu)\pi n}{2\phi_\mu}}}{\phi_\mu \left[ch\Lambda_\nu(\vartheta_{S\mu}-\vartheta_{B\nu})t \cos(2n+1)\frac{\pi\Lambda_\nu}{2\phi_\mu} + i\, sh\Lambda_\nu(\vartheta_{S\mu}-\vartheta_{B\nu})t \sin(2n+1)\frac{\pi\Lambda_\nu}{2\phi_\mu} \right]} , \qquad \text{(III 3.10)}$$

$$\operatorname*{Res}_{z = z_n(\Lambda_\nu)} f(z) = \frac{e^{-\frac{(\nu-2\mu)\pi}{4\Lambda_\nu} + i\frac{(\nu-2\mu)\vartheta_{B\nu} t}{2}} (-1)^n e^{-\frac{(\nu-2\mu)\pi}{2\Lambda_\nu} n}}{\Lambda_\nu \left[ch\phi_\mu(\vartheta_{S\mu}-\vartheta_{B\nu})t \cos(2n+1)\frac{\pi\phi_\mu}{2\Lambda_\nu} - i\, sh\phi_\mu(\vartheta_{S\mu}-\vartheta_{B\nu})t \sin(2n+1)\frac{\pi\phi_\mu}{2\Lambda_\nu} \right]} .$$

Ukoliko je $\nu-2\mu<0$ kontura se zatvara u donjoj poluravni:

$$L \to L^{(-)} =$$  ,

pa je:

$$I(\mu,\nu,t) = -2\pi i \left(\sum_{\substack{n=0 \\ z=\overset{*}{z}(\phi_\mu)}}^{\infty} \operatorname{Res} f(z) + \sum_{\substack{n=0 \\ z=\overset{*}{z}(\Lambda_\nu)}}^{\infty} \operatorname{Res} f(z) \right) \qquad \text{(III 3.11)}$$

pri čemu su reziduumi isti kao u (III 3.10), s tim što:

$$e^{-(2n+1)\frac{(\nu-2\mu)\pi}{4\phi_\mu}} \to e^{(2n+1)\frac{(\nu-2\mu)\pi}{4\phi_\mu}} ,$$

$$e^{-(2n+1)\frac{(\nu-2\mu)\pi}{4\Lambda}} \to e^{(2n+1)\frac{(\nu-2\mu)\pi}{4\Lambda_\nu}} .$$

Na osnovu ovoga možemo pisati:

$$I(\mu,\nu,t) = \frac{2\pi}{\Phi_\mu} e^{\frac{i(\nu-2\mu)\vartheta_{S\mu}t}{2} - \frac{|\nu-2\mu|\pi}{4\Phi_\mu}} S_1(\mu,\nu,t) +$$

$$+ \frac{2\pi}{\Lambda_\nu} e^{\frac{i(\nu-2\mu)\vartheta_{B\nu}t}{2} - \frac{|\nu-2\mu|\pi}{4\Lambda_\nu}} S_2(\mu,\nu,t), \tag{III 3.12}$$

gde su:

$$S_1(\mu,\nu,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n e^{-\frac{|\nu-2\mu|\pi}{2\Phi_\mu}n}}{ch\,\Lambda_\nu(\vartheta_{S\mu}-\vartheta_{B\nu})t\cos(2n+1)\frac{\pi\Lambda_\nu}{2\Phi_\mu} + i\,sh\,\Lambda_\nu(\vartheta_{S\mu}-\vartheta_{B\nu})t\sin(2n+1)\frac{\pi\Lambda_\nu}{2\Phi_\mu}}, \tag{III 3.13}$$

$$S_2(\mu,\nu,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n e^{-\frac{|\nu-2\mu|\pi}{2\Lambda_\nu}n}}{ch\,\Phi_\mu(\vartheta_{S\mu}-\vartheta_{B\nu})t\cos(2n+1)\frac{\pi\Phi_\mu}{2\Lambda_\nu} - i\,sh\,\Phi_\mu(\vartheta_{S\mu}-\vartheta_{B\nu})t\sin(2n+1)\frac{\pi\Phi_\mu}{2\Lambda_\nu}}. \tag{III 3.14}$$

U ovoj fazi računa nije mnogo postignuto. Umesto numeričkog proračuna integrala (III 3.7) trebalo bi numerički računati sume (III 3.13) i (III 3.14), što je, verovatno, nešto lakši problem. Srećna je medjutim okolnost da se u teoriji solitona vrlo često i sa dovoljno fizičkog opravdanja, može koristiti aproksimacija $|\vartheta_{S\mu}| \ll \vartheta_0$, odnosno $|\vartheta_{B\nu}| \ll \vartheta_0$. Tada na osnovu (III 3.8), (III 3.2) i (III 3.4) možemo pisati:

$$\frac{\pi\Lambda_\nu}{2\Phi_\mu} = \pi\,\frac{\vartheta_0^2-\vartheta_{S\mu}^2}{\vartheta_0^2-\vartheta_{B\nu}^2} \approx \pi \;; \quad \frac{\pi\Phi_\mu}{2\Lambda_\nu} = \frac{\pi}{4}\,\frac{\vartheta_0^2-\vartheta_{B\nu}^2}{\vartheta_0^2-\vartheta_{S\mu}^2} \approx \frac{\pi}{4} \tag{III 3.15}$$

S obzirom na (III 3.15) može se uzeti:

$$S_1(\mu,\nu,t) \approx S_1^{(0)}(\mu,\nu,t) = \frac{-1}{ch\,\Lambda_\nu(\vartheta_{S\mu}-\vartheta_{B\nu})t}\left(1+e^{-\frac{|\nu-2\mu|\pi}{2\Phi_\mu}}\right)^{-1}$$

(III 3.16)

$$S_2(\mu,\nu,t) \approx S_2^{(0)}(\mu,\nu,t) = \sqrt{2}\left(1+e^{-\frac{|\nu-2\mu|\pi}{\Lambda}}\right)^{-1} \times$$

$$\times \frac{\left(1+e^{-\frac{|\nu-2\mu|\pi}{2\Lambda_\nu}}\right)ch\,\Phi_\mu(\vartheta_{S\mu}-\vartheta_{B\nu})t + i\left(1-e^{-\frac{|\nu-2\mu|\pi}{2\Lambda_\nu}}\right)sh\,\Phi_\mu(\vartheta_{S\mu}-\vartheta_{B\nu})t}{ch^2\Phi_\mu(\vartheta_{S\mu}-\vartheta_{B\nu})t + sh^2\Phi_\mu(\vartheta_{S\mu}-\vartheta_{B\nu})t}$$

(III 3.17)

pa integral (III 3.7) možemo aproksimativno uzeti kao:

$$I(\mu,\nu,t) \approx I^{(0)}(\mu,\nu,t) =$$

$$= \frac{2\pi}{\Phi_\mu} S_1^{(0)}(\mu,\nu,t)\, e^{i\frac{|\nu-2\mu|\vartheta_{S\mu}t}{2} - \frac{|\nu-2\mu|\pi}{4\Phi_\mu}} + \frac{2\pi}{\Lambda_\nu} S_2^{(0)}(\mu,\nu,t)\, e^{i\frac{|\nu-2\mu|\vartheta_{B\nu}t}{2} - \frac{|\nu-2\mu|\pi}{4\Lambda_\nu}}$$

(III 3.18)

U dosadašnjim analizama nigde se nije pojavila veza izmedju solitonskih talasnih vektora K_1 i K_2 i bisolitonskog talasnog vektora K .Ovo je razumljivo, jer nehomogena i lokalna interakcija (III 3.1) narušava zakon o održanju impulsa.Osim toga,talasni paketi nemaju strogo definisan impuls.Gledano u ovom svetlu,dalju analizu možemo vršiti ili sa opštim formulama (III 3.5),(III 3.6) i (III 3.18) što bi izvanredno komplikovalo račune bez šanse da dobijemo koliko toliko traktabilan rezultat,ili pak možemo razmatrati nekakav specifičan slučaj,koji se svodi na nametanje veze izmedju K_1 , K_2 i K .Ograničićemo se ovom drugom varijantom i dalje razmatrati slučaj kada je:

$$K_1 = K_2 = \frac{K}{2}$$

(III 3.19)

što znači da ispitujemo verovatnoću procesa u kome dva slobodna solitona sa jednakim talasnim vektorima $K_1 = K_2 = \frac{K}{2}$ daju bisoliton sa talasnim vektorom K .Tada je:

$$I(K_1, K, t) = I(K_2, K, t) = I(\tfrac{K}{2}, K, t) \approx I^{(0)}(\tfrac{K}{2}, K, t),$$

pa na osnovu (III 3.16),(III 3.17) i (III 3.18) lako nalazimo:

$$I(\tfrac{K}{2}, K, t) \approx I^{(0)}(\tfrac{K}{2}, K, t) = 4\pi \frac{2\sqrt{2}\,\Omega_{S,\frac{K}{2}} - a\,\Omega_{BK}}{a^2 \Omega_{S,\frac{K}{2}}\, \Omega_{BK}}\;,$$

ili,s obzirom na (III 3.2) i (III 3.4):

$$I(\tfrac{K}{2}, K, t) \approx -\frac{2\pi a R M(\vartheta_0^2 - \vartheta_{BK}^2)}{\chi^2}\left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right). \qquad \text{(III 3.20)}$$

Ako (III 3.20) zamenimo u (III 3.6) dobijamo:

$$M_{if}(\tfrac{K}{2}, K, t) = \sqrt{2}\,\pi^2\left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right)^2 e^{-it(\omega_{BK} - 2\omega_{S,\frac{K}{2}})}. \qquad \text{(III 3.21)}$$

S obzirom na formu interakcije (III 3.1) postoje dve amplitude verovatnoće prelaza:

$$\alpha^{\pm}(T) = \frac{\sqrt{2}\,\pi^2\left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right) W}{i\hbar} \int_0^T dt\, e^{it(\pm\Omega + 2\omega_{S,\frac{K}{2}} - \omega_{BK})}. \qquad \text{(III 3.22)}$$

Ako je vreme T ,delovanja spoljašnjeg polja veliko u odnosu na recipročne frekvencije ω_S^{-1} i ω_B^{-1}, onda su prema (III 3.22) frekvencije prelaza:

$$\frac{\overset{+}{P}(T)}{T} \equiv \varphi_K^+ = |\alpha^+(T)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} W^2 I^2 \delta(E + 2E_{S,\frac{K}{2}} - E_{B,K}) ,$$

(III 3.23)

$$\frac{\overset{-}{P}(T)}{T} \equiv \varphi_K^- = |\alpha^-(T)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} W^2 I^2 \delta(-E + 2E_{S,\frac{K}{2}} - E_{B,K}) ,$$

(III 3.24)

gde je:

$$I = \pi^2 \sqrt{2}\left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right) , \qquad \text{(III 3.25)}$$

karakteristična konstanta za ovaj proces, čija je vrednost diktirana analitičkom formom solitonskih amplituda.

S obzirom na (III 3.2) i (III 3.4) možemo pisati:

$$\delta(E + 2E_{S,\frac{K}{2}} - E_{B,K}) = A^+\left[\delta(K - q_0^+) + \delta(K + q_0^+)\right] \qquad \text{(III 3.26)}$$

$$\delta(-E + 2E_{S,\frac{K}{2}} - E_{BK}) = A^-\left[\delta(K - q_0^-) + \delta(K + q_0^-)\right]$$

gde je:

$$A^\pm = \frac{\hbar v_0 Q^2 a^2 \varkappa_0}{4\sqrt{2}\,\chi^4 q_0^\pm} , \quad q_0^\pm = \varkappa_0 \sqrt{1 \pm \frac{RQ^2 a^4}{2\chi^4} E} , \quad \varkappa_0 = \frac{\hbar v_0}{R a^2 \sqrt{2}}$$

(III 3.27)

pa su frekvencije prelaza:

$$\varphi_K^\pm = \frac{2\pi}{\hbar} W^2 I^2 A^\pm \left[\delta(K - q_0^\pm) + \delta(K + q_0^\pm)\right]$$

(III 3.28)

Ovde možemo izvršiti analizu dobijenog rezultata.

Slučaj $K=q_0^+$ neprimenljiv je na solitone jer je maksimalna dozvoljena vrednost talasnog vektora solitona ili bisolitona u ovom slučaju $K_{max}=K_0=\frac{\hbar v_0}{a^2 R}<\varkappa_0<q_0^+$. Zbog ovoga su δ-funkcije koje figurišu u izrazu φ^+ ravne nuli,pa je ovaj prelaz u solitonskim procesima zabranjen ($\varphi^+=0$).

Slučaj $K=q^-$,tj. $q_0<\varkappa_0$ odgovara procesu fuzije koji ispitujemo,jer tada dobijena kvazičestica ima manju energiju od sume energija inicijalnih solitona i predstavlja vezano stanje,tj. bisoliton.Prema tome,frekvencija fuzije dva slobodna solitona sa impulsom $\frac{\hbar K}{2}$ u bisoliton sa impulsom $\hbar K$ je:

$$\varphi_K^- \equiv \varphi_K = \frac{2\pi}{\hbar} W^2 I^2 A\left[\delta(K-q_0)+\delta(K+q_0)\right] , \qquad \text{(III 3.29)}$$

$$A = \frac{\hbar v_0 Q^2 a^2 K_0}{4\sqrt{2}\,\chi^4 q_0} , \qquad q_0 = \varkappa_0 \sqrt{1-\frac{RQ^2a^4}{2\chi^4}E} .$$

Iz (III 3.29) se vidi da q_0 mora biti realno i manje od $K_0=\frac{\hbar v_0}{a^2 R}$ pa je interval dozvoljenih energija:

$$0 < E < \frac{2\chi^4}{RQ^2a^4} = G(0) \qquad \text{(III 3.30)}$$

gde je $G(0)$ prema (III 1.52),energija veze bisolitona pri $K=0$ .Odavde se može zaključiti da je proces spontane fuzije ($E=0$) nemoguć,jer vrednost $E=0$ ne ulazi u dozvoljeni interval (III 3.30).

Ako φ_K integralimo po svim talasnim vektorima, onda je:

$$\varphi = \frac{L}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dK\,\varphi_K = \frac{Na}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dK\,\varphi_K = \frac{Na^3Q^2v_0I^2W^2\varkappa_0}{4\sqrt{2}\,\chi^4 q_0}, \qquad \text{(III 3.31)}$$

što za $a \sim 5\cdot10^{-8}cm$, $N\sim10^8$, $v_0\sim10^5 cm\,s^{-1}$, $\chi\sim10^{-13}erg$, $W\sim10^{-14}erg$ i $\frac{\varkappa_0}{q_0}\sim1$ daje $\varphi\sim7\cdot10^{15}s^{-1}$, tj. oko 10^{16} fuzija u sekundi.

Izložena analiza je više šematskog nego konkretnog karaktera i daje nam odgovor na pitanje pod kojim uslovom i sa kojom frekvencijom može da dodje do spajanja dva solitona u bisoliton. Moguća uopštavanja ove šeme bila bi sledeća:

a) Može se razmatrati proces obrazovanja bisolitona pod dejstvom interakcije tipa spoljašnje električno polje $\times$ dipol. Unutrašnji dipolni momenat može se razložiti ili po eksitonskim ili po solitonskim operatorima. Ovakva interakcija, bar u principu može da dovede do spajanja eksitona i solitona u bisoliton ili do spajanja dva solitona u bisoliton.

b) U okviru izloženog prilaza može se razmatrati slučaj kada dva slobodna solitona sa suprotno usmerenim talasnim vektorima $\frac{K}{2}$ i $-\frac{K}{2}$, obrazuju bisoliton koji se ne kreće, tj. bisoliton sa nultim impulsom. Pomoću formula (III 3.16) - (III 3.18) može se naći izraz za amplitudu pomenutog prelaza, ali je njena vremenska zavisnost složenija od one koja je data u (III 3.22) i zahtevala bi po svoj prilici numerički račun u slučaju da se traži konkretan brojni rezultat.

c) Takodje su interesantne transformacije tipa soliton-bisoliton i bisoliton-bieksiton pod dejstvom različitih polja sila. Ova pitanja su obradjivana u radovima /115,116/.

d) Sa praktične tačke gledišta svakako su najznačajniji procesi zahvata elektrona solitonoma. Ova problematika delimično je obradjivana u radovima /2,117/. S tačke gledišta analiza koje su ovde izvršene formalni doprinos problemima zahvata bi bio postupak za rešavanje integrala (III 3.9) jer se takav i slični tipovi integrala pojavljuju u svim procesima koji se odigravaju uz učešće solitona.

Z A K LJ U Č A K

Rezultati izvršenih analiza mogu se kratko formulisati na sledeći način:

a) Analiza fundamentalnih pitanja solitonske teorije pokazala je da kvantna i kvaziklasična teorija ne daju iste rezultate,jer prema kvantnoj teoriji , solitoni imaju nižu energiju i mogu se obrazovati samo u sistemu koherentnih kvazičestičnih stanja.U ovom svetlu kvaziklasični prilaz se može shvatiti samo kaorelativno dobra aproksimacija kvantnog prilaza.Singulariteti u solitonskom spektru ne postoje,i u postojećim teorijama se pojavljuju zbog toga što se koriste talasne funkcije za jednu fiksiranu vrednost talasnog vektora umesto linearnih kombinacija ovih funkcija uzetih po svim vrednostima talasnog vektora.Uvodjenjem linearnih kombinacija,singulariteti se mogu eliminisati.

b) Razradjeni su metodi analize solitona u sistemima u kojima se broj osnovnih kvazičestica ne održava i ispitan je uticaj neodržanja na karakteristike solitonskog spektra.Bitna posledica neodržanja je "razmazivanje" solitonskog paketa.Takodje je razradjen metod analize solitona u sistemima u kojima dolazi do beteovskog razdvajanja zona,i ispitivane su osnovne solitonske karakteristike u ovakvim sistemima.Data je kvaziklasična teorija bisolitona u prostim sistemima i u sistemima sa beteovskim razdvajanjem zona.Uticaj temperature testiran je na problemu KDP-feroelektrika i pokazano je da solitoni iščezavaju u okolini temperature prelaza.

c) Analiza procesa fuzije dva solitona u bisoliton pokazala je da se ovaj proces odvija sa relativno visokom frekvencijom od oko 10^{16} fuzija u sekundi.

d) Analiza solitona u feromagneticima potvrdila je postojeće verovanje da solitoni u ovim strukturama duguju svoj nastanak interakciji spinskih talasa izmedju sebe,a ne interakciji spinskih talasa sa fononima /77/.U ovom smislu solitoni u feromagneticima se bitno razlikuju od solitona u molekularnim kristalima.

e) Zakljičci Davidova i saradnika i Skota /4,5/ o vibronskim solitonima u α-proteinima ne mogu biti prihvaćeni kao potpuno objektivni.Metod koji se u ovim analizama primenjuje dopušta čitav niz proizvoljnosti koje umanjiju verodostojnost i realističnost izvedenih zaključaka.Očigledno je da bi ovu teoriju trebalo testirati prelaskom na ekvivalentni hamiltonijan,kao što je to učinjeno u sistemu sa beteovskim razdvajanjem zona.Ekvivalentni hamiltonijan daje približne rezultate,ali bi ovi mogli da posluže kao siguran kriterijum o tome, koja rešenja iz serije koju dopušta prilaz Davidova i Skota,treba odabrati kao realno postojeća.

Na kraju bih želela da naglasim da neki metodi analize koji su ovde razvijeni pružaju mogućnost za iznalaženje novih,do sada neispitanih solitonskih efekata.Ovakva istraživanja,koja bi eventualno ukazala na još neke puteve za neposrednu primenu solitonskog mehanizma,po obimu bi prevazišla i bez toga obiman materijal ove disertacije,pa će to ostati predmet mog budućeg rada u teoriji solitona.

L I T E R A T U R A

/1/ Russel J.S., Report on Waves.14 th Meeting of the British Assoc.Adv.Sci.,London,p.311,1844.

/2/ Davydov A.S.,Solitony v molekulyarnyh sistemah,Naukova Dumka,Kiev,1984.

/3/ Davydov A.S.,Biologiya i kvantowaya mehanika,Naukova Dumka,Kiev,1979.

/4/ Davydov A.S.,Eremko A.A.,Sergienko A.I., Ukr.Fiz.Zhur. 23,6,983-993,1978.

/5/ Scott A.C.,Physica Scripta 29,279-283,1984.

/6/ Zabusky N.,Kruskal M.D., Phys.Rev.Lett. 15,240,1965.

/7/ Korteweg D.J.,de Vries G., Phyl.Mag.39,422-443,1~~985~~ 895.

/8/ Kadomcev V.I.,Karpman V.I., Usp.Fiz.Nauk 109,2, 193--231,1971.

/9/ Tappert F.D., Phys.Fluids 15,2446-2447,1972.

/10/ Ichkawa T.H., Physica Scripta 20,3/4,296-305,1979.

/11/ Karpman V.I., Phys.Rev.Lett. 25A,708-709,1967.

/12/ Karpman V.I., Phys.Scripta 20,3/4,462-478,1979.

/13/ Kawahara J., J.Phys.Soc.Japan 27,1331-1340,1969.

/14/ Toda M.,J.Phys.Soc.Japan 23,501-520,1967.

/15/ Toda M.,J.Phys,Soc.Japan 22,2,431-444,1967.

/16/ Toda M.,Progr.Theor.Phys.Suppl. 45,174-200,1970.

/17/ Toda M.,Phys.Reports 18C,1,1-23,1975.

/18/ Toda M.,Phys.Scripta 20,3/4,422-430,1979.

/19/ Toda M.,Waddati M.A., J.Phys.Soc.Japan 34,18-25,1973.

/20/ Zabusky N.J.,Acad.Press.,N.Y.,203-222,1967.

/21/ Zabusky N.J.,Comp.Phys.Commun. 5,1-10,1973.

/22/ Rubinstein J.,J.Math.Phys. 11,258-268,1970.

/23/ Frenkel Y.I.,Kontorova T.A.,Zhur.Eksp.i Teor.Fiz. 8, 89-97,1938.

/24/ Parmentie R., Solitony v deystvii,M.:Mir,185-209,1981.

/25/ Faddeev L.D., Usp.Mat.Nauk. 14,57-89,1959.

/26/ Bogan A.C.,Hanines C.R.,Stuart A.F.G., Nuovo Cimento ser.11,58,B,1-33,1980.

/27/ Cologero F.,Nonlinear evolution equations soluable by the spectral transform.Pitman,London, 189,1978.

/28/ Faddeev L.D.,Korepin V.E.,Phys.Report 42C,1,1-87,1978.

/29/ Karpman V.I.,Phys.Scripta 2o,3/4,463-478,1979.

/30/ Scott A.C.,Chu F.Y.E.,Reible S.A.,J.Appl.Phys. 47, 3272,1976.

/31/ Bullough R.K.,Caudrey P.J., Solitons,New York,1980.

/32/ Davydov A.S.,Ermenko A.A.,Ukr.Fiz.Zh. 22,881,1977.

/33/ Davydov A.S.,Kisluha N.I.,Zh.Eksp.Teor.Fiz. 71,1090, 1976.

/34/ Davydov A.S.,Phys.Scr. 20,387,1979.

/35/ Davydov A.S.,Zh.Eksp.Teor.Fiz. 78,789,1980.

/36/ Davydov A.S.,Usp.Fiz.Nauk. 138,603,1982.

/37/ Davydov A.S.,Phys.Stat.Sol.(b) 102,275,1980.

/38/ Davydov A.S., Phys.Stat.Sol.(b) 115,15,1983.

/39/ Davydov A.S.,Zolotaryuk A. V.,Phys.Stat.Sol.(b) 115, 631-640,1983.

/40/ Davydov A.S.,Enoliskii V.Z., Zh.Eksp.Teor.Fiz. 79, 5(11),1888-1897,1980.

/41/ Bogolybov N.N.,Selected papers,Naukova Dumka Kiev 1971 (na ruskom).

/42/ Agranovich V.M.,Zh.Teor.Fiz. 37,430,1959.

/43/ Agranovich V.M., Theory of excitons,Nauka,Moskwa, 1978 (na ruskom).

/44/ Messia A., Kvantovaya mehanika,Nauka,Moskwa,1979 (na ruskom).

/45/ Brown D.W.,Lindenberg K.,West J.B., Phys.Rev.A 33, 4104,1986.

/46/ Stojanović S.,Šetrajčić J.Škrinjar M.Tošić B., Phys. Stat.Sol.(b) 79,433,1976.

/47/ Škrinjar M.,Kapor D.,Škrbić Ž.,Šetrajčić J.,Phys. Stat.Sol.(b) 125,K1 51,1984.

/48/ Fröhlich H., Phys.Rev. 79,845,1950.

/49/ Fröhlich H., Phys.Rev. 223,296,1954.

/50/ Kerr W.C.,Lomdahl P.S., Phys.Rev. B 7,1987.

/51/ Keldysh I.V.,Problems of theoretical physics,Nauka, Moskwa 1972 (na ruskom).

/52/ Marinković M.M.,Phys.Stat.Sol. (b) 69,291,1975.

/53/ Marinković M .M.,Maksimov J.,Škrbić Ž., Physica 80C, 585,1975.

/54/ Marinković M.M.,Tošić B.S., Phys.Stat.Sol.(b) 67, 435,1975.

/55/ Takeno S., Prog.Theor.Phys. 69,6,1798,1983.

/56/ Takeno S., Prog.Theor.Phys. 73,4,853,1985.

/57/ Tošić B.S., Phys.Stat.Sol.(b) 48,K 129,1971.

/58/ Landau L.D., Sbornik trudov T.1.,-M.:Nauka,90-91,1969.

/59/ Landau L. , Phys.Z.Sovwjetunion 3,664-666,1933.

/60/ Pekar S.I., Zh.Eksp.Teor.Fiz. 16,335-340,1946.

/61/ Pekar S.I., Isledovanya po elektroi teorii kristalov, -M.:Gostehizdat,1951.

/62/ Ivanov B.A.,Kosevich A.M., Pisma Zh.Eksp.Teor.Fiz. 24, 9,495-499,1976.

/63/ Davydov A.S., Zh.Eksp.Teor.Fiz. 18,210,1948.

/64/ Davydov A.S., Teoriya molekulyarnikh eksitonov,-M.: Nauka,1968.

/65/ Davydov A.S., Teorija tverdogo tela,-M.:Nauka,1976.

/66/ Noks R., Teoriya eksitonov,Mir,1966.

/67/ Lalović D.I.,Tošić B.S.,Žakula R.B., Phys.Rev. 178, 1472,1969.

/68/ Mašković Lj.D.,Stojanović S.D.,Škrinjar M.J.,Zbornik radova 15,1985.

/69/ Škrinjar M.J.,Stojanović S.D.,Mašković Lj.D., J.Phys. C :Sol.Stat.Phys. 18,525-528,1985.

/70/ Cieplak M.,Turski L.A., J.Phys. C :Sol.Stat.Phys. 13, 5741,1980.

/71/ Jauslin H.R.,Schneider T., Phys.Rev. B 26,5153,1982.

/72/ Magyari E., Phys.C :Sol.Stat.Phys. 15,L1159,1982.

/73/ Mikeska H.J.,Phys.Rev. B 26,5213,1982.

/74/ Ryzhov V.N.,J.Phys. C :Sol.Stat.Phys. 16 L 1125,1983.

/75/ Tjon J.,Wright J.,Phys.Rev. B 15,3470,1977.

/76/ Pushkarov D.I.,Pushkarov H.I., Phys.Lett. 61 A,339, 1977.

/77/ Schneider T., Phys.Rev. B 24,5327,1981.

/78/ de Azevedo L.G.,de Moura,Cordeiro C.,Žekš B.,J.Phys.C: Sol.Stat.Phys. 13,7391,1982.

/79/ Mikeska H.,J.Phys. C :Sol.Stat.Phys. 11,129,1978.

/80/ Kjems K.,Steiner M., Phys.Rev.Lett. 41,1137,1978.

/81/ Kopinga K.,Tinus A.M.C.,de Jong W.J.M., Phys.Rev. B29, 2868,1984.

/82/ Long K.A.,Bishop A.R., J.Phys. A:Math.Gen. 12,1325, 1979.

/83/ de Alcantra O.F.Bonfim,Moura M.A.,Phys.Lett 94A,239, 1983.

/84/ Nakamura K.,Sasada T.,Bishop A.R., J.Phys.C: Sol.Stat. Phys. 16,3771,1983.

/85/ Dzyub I.P.,Zerov Yu., Phys.Lett. 99A,350,1983.

/86/ Holstein T.,Primakoff H., Phys.Rev. 58,1o98,1940.

/87/ Blinc R.,Žekš B.,Soft Modes in Ferrolectrics and Antiferroelectrics,Amsterdam,1974.

/88/ Chabin M.,Gilleta F.,Ferroel. 15,149-55,1977.

/89/ Elliot R.J.,Wood C., J.Phys. C 4,2359-68,1971.

/90/ Dzyaloshinskii I.E.,Pitaevski L.P., Zh.Eksp.Teor.Fiz. 36,1979-86,1959.

/91/ Pearcy P.S., Phys.Rev. B 9,4868-77,1974.

/92/ Pearcy P.S. , Sol.Stat.Comm. 16,434-42,1975.

/93/ Stinchcombe R.B., J.Phys. C 6,2434-59,1973.

/94/ Tokunaga M.,Matsubara T., Progr.Theor.Phys. 35,581-94, 1966.

/95/ Yanase A.,Takeshige Y.,Suzuki M.,J.Phys.Soc.Japan 41,1108,1976.

/96/ Wang Y.L.,Cooper B.R., Phys.Rev. 172,539-52,1986.

/97/ Mirjanić D.Lj.,Pirić M.,Tošić B.S., Phys.Lett. A 99, 41-4,1982.

/98/ Kapor D.V.,Doktorska disertacija,Novi Sad,1979.

/99/ Kapor D.V.,Tošić B.S., Physica A 103,609-20,1980.

/100/ Vaks V.G.,Introduction to the Microscopic Theory of Ferroelectrics,Nauka Moskwa,1973.

/101/ Tyablikov S.V., Methods of Quantum Theory in Magnetizm, Moskwa,Nauka,1975.

/102/ Tošić B., Statistička fizika,Novi Sad,1978.

/103/ Tošić B.S.,JINR P4, 5895,1971.

/104/ Božić-Popović M.,Lalović D.I.,Tošić B.S.,Žakula R.B., Can.Journ.Phys. 50,898,1972.

/105/ Božić-Popović M.,Tošić B.S., Phys.Stat.Sol. 59,667,1973.

/106/ Tošić B.S.,Marinković M.M., Phys.Lett. 51A,127,1975.

/107/ Mirjanić D.Lj.,Marinković M.M.,Knežević G.,Tošić B.S., Phys.Stat.Sol.(b) 121,589,1984.

/108/ Brizhik L.S., Fiz.Niskikh Temp. 12,769-772,1986.

/109/ Mašković Lj.,Kapor D.V.,Šetrajčić J.P.,Tošić B.S., Phys.Lett. 114A,6,289,1986.

/110/ Agranovich V.M.,Toshich B.S., Zh.Eksp.Teor.Fiz. 53, 149,1967.

/111/ Lalović D.I.,Tošić B.S.,Vujaklija J.B.,Žakula R.B., Nuovo Cimento 68B,75,1970.

/112/ Landau L.D.,Lifshits E.M.,Kvantovaya mehanika, M.: GITTL,1963.

/113/ Dirac P.A.M.,The Principles of Quantum Mechanics, Oxford,1958.

/114/ Davydov A.S., Kvantovaya mehanika, M.:Nauka,1973.

/115/ Satarić M.V.,Žakula R.B., Physica 110A,580-592,1982.

/116/ Stamenković S.,Žakula R.B., Physica 102A,554-560,1980.

/117/ Satarić M.,Žakula R.B., Phys.Stat.Sol.(b), 116,617, 1983.

ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
ДЕПАРТМАН ЗА ФИЗИКУ
БИБЛИОТЕКА
* НОВИ САД *