DIPLOMSKI RAD

MILJOJKOVIĆ GRADIMIR

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

PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

K R I T I Č K A A N A L I Z A D A V I D O V S K I H S O L I T O N A U M O L E K U L A R N I M L A N C I M A

-diplomski rad-

Miljojković Gradimir

Novi Sad, decembar 1987

Zahvaljujem se dr Mariju Škrinjaru
na pomoći prilikom izrade ovoga
rada

Miljojković Gradimir

SADRŽAJ:

POJAM SOLITONSKOG TALASA ,NASTAJANJE ,OSNOVNE JEDNAČINE I KARAKTERISTIKE SOLITONA

Solitonski talasi su se prvi put pojavili kao pojam u radovima John Scott Russel-a izdatim u Edinburgu 1834 godine. Oni su predstavljali rezultat istraživanja jedne pojave koju je Russel uočio: posmatrajući prostiranje talasa na vodi jednom prilikom je, kada se šlep koji je prolazio kroz kanal naglo zaustavio, od njega odvojio "usamljeni talas", jedno zaobljeno povišenje nivoa vode (visine 0,3m širine oko 0,5m i dužine fronta oko 10m); tj u pitanju je bio samo jedan talas a ne više talasa koji bi sledili jedan za drugim kao što je uobičajeno. Talas se kretao bez promene oblika i brzine i po nekoliko kilometara.

Talasi koji su im slični su talasi cunami koji se javljaju na Pacifiku posle jačih zemljotresa.

Da bi se razumeo mehanizam nastajanja solitonskog talasa može se razmatrati slučaj talasnog paketa koji je formiran u nekoj sredini. Ako nema trenja i ako se pretpostavi da se svi njegovi delovi prostiru istom brzinom, on će se kretati bez promene oblika. Ako bi se uzelo u obzir i trenje talas bi ubrzo nestao zbog gubitka energije. Medjutim trenje nije jedini uzrok promene oblika talasa. Pošto je u pitanju superpozicija ravnih talasa, talasi različite talasne dužine će se prostirati različitom brzinom što je posledica disperzije. Rezultat toga je da će se talas "rasplinjavati" , amplituda će mu se smanjivati i on će se izgubiti.

Oblik talasa se može promeniti i ako je sredina nedisperzivna i ako nema trenja. Ovo se dogadja u nelinearnoj sredini čije osobine zavise od stanja sredine. U nelinearnoj sredini talas će menjati svoj oblik.

Ako sredina nema disperziju i nelinearnost a trenje je zanemarljivo, talas će se prostirati bez promene oblika. No, isto tako se može desiti da se talas kreće bez promene oblika i kroz disperzivnu i nelinearnu sredinu pod odredjenim uslovima kada se efekti nelinearnosti i disperzivnosti sredine potiru.Takav talas se naziva soliton ili usamljeni talas.

Naučnici Korteweg i de Vries su krajem 19 veka rešavali jednačinu talasnog kretanja u pravougaonom kanalu sa vodom i medju ostalim partikularnim rešenjima našli jedno koje opisuje talase koji se u nelinearnoj sredini sa disperzijom kreću bez promene oblika.

Za slučaj male dubine kanala ova jednačina je imala oblik:

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

gde je U- srednja brzina tečnosti u datom preseku a β je parametar koji karakteriše disperziju. Nelinearnost sredine se ogleda u nelinearnosti diferencijalnih jednačina koje opisuju kretanje talasa kroz tu sredinu što u ovom slučaju pokazuje drugi član u izrazu. Ova jednačina se zove

Korteweg- de Vries-ova jednačina.(videti /1/).

Solitoni opisani tom jednačinom imaju osobinu očuvanja oblika i brzine posle uzajamnog dejstva. Ta osobina podseća na osobinu nekih elementarnih čestica (proton, elektron, neutron) pa je odatle i izveden naziv soliton dok je ranije korišten naziv usamljeni talas (solitary wave).

Solitonski talasi se javljaju i u drugim sredinama: plazmi, poluprovodnicima, superprovodnicima, feromagneticima, biološkim strukturama (npr belančevinama, ogromnim molekulima sastavljenim iz amino-kiselina medjusobno povezanih peptidnim vezama. Ovi molekuli zahvaljujući pravilnom rasporedu podsećaju na kristalni niz).

Iako postoji veliki broj sredina u kojima nastaju solitoni i iako je priroda talasakoji nastaju u njima u opštem slučaju različita, jednačine koje opisuju prostiranje solitona kroz njih su slične ili identične. Ipak, parametri koji ulaze u ove jednačine imaju za svaki poseban slučaj posebni fizički smisao.

Naprimer, za opisivanje samofokusiranja u nelinearnoj optici i u nekim problemima fizike plazme koristi se nelinearna Schrodingerova jednačina koja u jednodimenzionalnom slučaju ima oblik:

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

gde je $\frac{\hbar}{2m^*}$ parametar koji definiše disperzivnost a G nelinearnost sredine.

Takodje neki problemi teorije superprovodnosti i feromagnetizma rešavaju se pomoću jednačine Sine-Gordona koja u jednodimenzionalnom slučaju ima oblik:

$$C_0^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \omega_0^2 \sin \Psi \qquad (1.3)$$

gde je C_0^2 parametar koji definiše disperzivnost a ω_0^2 nelinearnost sredine.

Sine-Gordonova jednačina je specijalan slučaj Klein-Gordonove jednačine koja glasi:

$$C_0^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \omega_0^2 \frac{dV}{d\Psi} \qquad (1.4)$$

gde je $V=V(\Psi)$ zadani potencijal (kod S. G. je $V=1-\cos\Psi$). (opširnije o (1.3) i (1.4) videti u /8/)

Cilj rada je, što sledi i iz njegovog naziva, analiza rezultata vezanih za transport energije u vidu solitonskih talasa kroz molekularne sisteme; zbog jednostavnosti razmatranja analizira se prostiranje energije u molekularnim lancima.

DAVIDOVSKI SOLITONI U MOLEKULARNIM LANCIMA

Sovjetski naučnik Davidov je sa saradnicima i drugim istraživačima razmatrao prostiranje solitonskih talasa u biološkim sistemima, u specijalnom slučaju u molekularnim lancima.

Hamiltonijan sistema je uzeo u obliku (videti (2.1) u /1/):

$$H = H_{ex} + H_{ph} + H_{int} \tag{2.1}$$

gde je prvi član operator energije unutarmolekularnih pobudjenja (eksitona). Drugi član odredjuje energiju fononskog polja, dok treći član opisuje eksiton-fonon interakciju.

Konkretan oblik pojedinih članova je:

$$H_{ex} = \sum_n B_n^+ \left[\mathcal{E}_0 B_n - J \left(B_{n+1} + B_{n-1} \right) \right]$$

$$H_{ph} = \frac{1}{2} \sum_n \left[\frac{\hat{P}_n^2}{M} + \varkappa \left(u_n - u_{n-1} \right)^2 \right] \tag{2.1.a}$$

$$H_{int} = \chi \sum_n B_n^+ B_n \left(u_{n+1} - u_{n-1} \right)$$

(B^+ i B su boze operatori kreacije i anihilacije eksitona, $\varkappa$ je parametar uzdužne elastičnosti niza, $\hat{P}_n$ je operator impulsa za n-ti molekul u nizu sa kanonski konjugovanim operatorom položaja u_n).

Energija rezonantnog uzajamnog dejstva ($-J$) medju susednim molekulima izražava se preko dipolnog momenta prelaza kao:

$$J = \begin{cases} 2d^2/a^3 & \text{za d u pravcu niza} \\ -d^2/a^3 & \text{za d normalno na niz} \end{cases}$$

Talasna funkcija kolektivnog pobudjenja niza za oblik Hamiltonijana (2.1) je uzeta u obliku:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n A_n(t) B_n^+ \exp(\sigma(t))|0\rangle$$
$$\sigma(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_n [\beta_n(t)\hat{p}_n - \pi_n(t) u_n] \tag{2.2}$$

Iz uslova normiranja se dobija da je:

$$\sum_n |A_n|^2 = 1$$

Pokazuje se da su veličine $\beta_n(t)$ i $\pi_n(t)$ srednje vrednosti operatora položaja odnosno impulsa:

$$\langle \Psi(t)|\hat{P}_n|\Psi(t)\rangle = \langle 0|\sum_{\ell\ell'} e^{-\sigma} B_\ell A_\ell^* P_n A_{\ell'} B_{\ell'}^+ e^{\sigma}|0\rangle$$

Koristeći Vajlov identitet sledi:

$$e^{-\sigma} P_n e^{\sigma} = P_n - [\sigma, P_n] = P_n + \pi_n \qquad \text{jer je}$$

$$[\sigma, P_n] = \frac{1}{i\hbar}\sum_p \Big\{\beta_n \underbrace{[P_p, P_n]}_{0} - \pi_p \underbrace{[u_p, P_n]}_{i\hbar\delta_{p,n}}\Big\} = -\pi_n$$

Odatle sledi: $\langle \Psi|\hat{P}_n|\Psi\rangle = \pi_n$

Slično se pokazuje:

$$\langle \Psi(t)|u_n|\Psi(t)\rangle = \langle 0|\sum_{\ell\ell'} e^{-\sigma} B_\ell A_\ell^* u_n A_{\ell'} B_{\ell'}^+ e^{\sigma}|0\rangle$$

$$e^{-\sigma} u_n e^{\sigma} = u_n - [\sigma, u_n] \quad , \quad [\sigma, u_n] = \frac{1}{i\hbar}\sum_s \Big\{\beta_s \cdot \underbrace{[P_s, u_n]}_{-i\hbar\delta_{s,n}} - \pi_s \underbrace{[u_s, u_n]}_{0}\Big\} = -\beta_n$$

Odatle sledi: $\langle \Psi|u_n|\Psi\rangle = \beta_n$

Srednja vrednost Hamiltonijana u stanju (2.2) je:

$$\langle \Psi(t)|H|\Psi(t)\rangle = \sum_{nn'\ell} \langle_n 0|e^{-\sigma} B_n A_n^* \Big\{B_\ell^+\big[E_0 B_\ell - J[B_{\ell+1} + B_{\ell-1}]\big] + \frac{1}{2}\Big[\frac{1}{M}\hat{P}_\ell^2 + \varkappa(u_\ell - u_{\ell-1})^2\Big] + \chi B_\ell^+ B_\ell [u_{\ell+1} - u_{\ell-1}]\Big\} \times$$
$$\times A_{n'} B_{n'}^+ e^{\sigma}|0\rangle_{n'}$$

$$I: \sum_{nn'l} {}_n\langle 0| e^{-\mathcal{b}} B_n A_n^* B_l^+ [\mathcal{E}_0 B_l - J(B_{l+1} + B_{l-1})] A_{n'} B_{n'}^+ \times$$

$$e^{\mathcal{b}} |0\rangle = \sum_{nn'l} {}_n\langle 0| B_n A_n^* B_l^+ [\mathcal{E}_0 B_l - J(B_{l+1} + B_{l-1})] A_{n'} |1_{n'}\rangle =$$

$$= \sum_{nn'l} \{ \langle 0| B_n A_n^* B_l^+ \mathcal{E}_0 A_{n'} |0_l\rangle \delta_{ln'} - \langle 0| B_n A_n^* B_l^+ A_{n'} J |0_{l+1}\rangle \times$$

$$\times \delta_{n', l+1} - \langle 0| B_n A_n^* B_l^+ A_{n'} J |0_{l-1}\rangle \delta_{n', l-1} \} = \sum_{nl} \{ \langle 0| B_n \times$$

$$A_n^* A_l \mathcal{E}_0 B_l^+ |0_l\rangle - \langle 0| B_n A_n^* A_{l+1} J B_l^+ |0_{l+1}\rangle - \langle 0| B_n \times$$

$$A_n^* A_{l-1} J B_l^+ |0_{l-1}\rangle \} = \sum_{nl} \{ \langle 0| B_n A_n^* A_l \mathcal{E}_0 |1_l\rangle -$$

$$- \langle 0| B_n A_n^* A_{l+1} J |1_l\rangle - \langle 0| B_n A_n^* A_{l-1} J |1_l\rangle \} =$$

$$= \sum_{nl} \{ A_n^* A_l \mathcal{E}_0 \delta_{ln} - A_n^* A_{l+1} J \delta_{ln} - J A_n^* A_{l-1} \delta_{ln} \} =$$

$$= \sum_n A_n^* \{ A_n \mathcal{E}_0 - J (A_{n+1} + A_{n-1}) \}$$

$$II: \frac{1}{2} \sum_{nn'l} \langle 0| B_n A_n^* \{ e^{-\mathcal{b}} \frac{P_l^2}{M} e^{\mathcal{b}} + \varkappa e^{-\mathcal{b}} (u_l - u_{l-1})^2 \times$$

$$\times e^{\mathcal{b}} \} A_{n'} B_{n'}^+ |0\rangle = \frac{1}{2} \sum_{nn'l} \{ \langle 0| B_n A_n^* A_{n'} (\frac{P_l^2}{M} + \frac{2 P_l \Pi_l}{M} +$$

$$+ \frac{\Pi_l^2}{M}) |1_{n'}\rangle + A_n^* A_{n'} \varkappa (\langle 0| B_n (u_l^2 + 2 u_l \beta_l + \beta_{(l-1)}^2) |1_{n'}\rangle -$$

$$- 2 \langle 0| B_n (e^{-\mathcal{b}} u_l e^{\mathcal{b}} e^{-\mathcal{b}} u_{l-1} e^{\mathcal{b}}) |1_{n'}\rangle + \langle 0| B_n (u_{l-1}^2 +$$

$$+ 2 u_{l-1} \beta_{l-1} + \beta_{l-1}^2) |1_{n'}\rangle) \} = *$$

(Pošto je: $e^{-\mathcal{b}} P_l^2 e^{\mathcal{b}} = \sum_k \frac{(-1)^k}{k!} [\mathcal{b}, \dots, [\mathcal{b}, P_l^2] \dots]$

$, [\mathcal{b}, P_l^2] = P_l [\mathcal{b}, P_l] + [\mathcal{b}, P_l] P_l = -2 P_l \Pi_l ,$

$, [\mathcal{b}, [\mathcal{b}, P_l^2]] = -2 \Pi_l [\mathcal{b}, P_l] = 2 \Pi_l^2 \Rightarrow e^{-\mathcal{b}} P_l e^{\mathcal{b}} =$

$= P_l^2 + 2 P_l \Pi_l + \Pi_l^2 = (P_l + \Pi_l)^2$

Slično: $e^{-\mathcal{b}}\mathcal{U}_\ell^2 e^{\mathcal{b}} = (\mathcal{U}_\ell + \beta_\ell)^2$ jer je $[\mathcal{b}, \mathcal{U}_\ell^2] =$
$= -2\beta_\ell \mathcal{U}_\ell$)

$$* = \frac{1}{2}\sum_{nn'\ell}\Big\{\langle 0|B_n A_n^* A_{n'} \frac{\Pi_\ell^2}{M}|1_{n'}\rangle + A_n^* A_{n'} \mathcal{H} \times$$
$$\times\big(\langle 0|B_n \beta_\ell^2|1_{n'}\rangle - 2\langle 0|B_n \beta_\ell \beta_{\ell-1}|1_{n'}\rangle + \langle 0|\times$$
$$\times B_n \beta_{\ell-1}^2|1_{n'}\rangle\big)\Big\} = \frac{1}{2}\sum_{nn'\ell}\Big\{A_n^* A_{n'} \frac{\Pi_\ell^2}{M}\delta_{nn'} + A_n^* A_{n'} \mathcal{H}\times$$
$$(\beta_\ell^2 \delta_{nn'} - 2\beta_\ell \beta_{\ell-1}\delta_{nn'} + \beta_{\ell-1}^2 \delta_{nn'})\Big\} = \frac{1}{2}\sum_{n\ell} A_n^* A_n \times$$
$$\times\Big\{\frac{\Pi_\ell^2}{M} + \mathcal{H}(\beta_\ell - \beta_{\ell-1})^2\Big\}$$

$$\underline{\mathrm{III}}: \quad \sum_{nn'\ell}\langle 0|e^{-\mathcal{b}} B_n A_n^* \chi B_\ell^+ B_\ell (\mathcal{U}_{\ell+1} - \mathcal{U}_{\ell-1}) A_{n'}\times$$
$$\times B_{n'}^+ e^{\mathcal{b}}|0\rangle = \sum_{nn'\ell}\Big\{A_n^* A_{n'}\chi\big(\langle 0|B_n e^{-\mathcal{b}}\mathcal{U}_{\ell+1} e^{\mathcal{b}} B_\ell^+ \times$$
$$B_\ell|1_{n'}\rangle - \langle 0|B_n e^{-\mathcal{b}}\mathcal{U}_{\ell-1} e^{\mathcal{b}} B_\ell^+ B_\ell|1_{n'}\rangle\big)\Big\} = \sum_{nn'}\Big\{A_n^*\times$$
$$A_{n'}\chi\big(\langle 0|B_n \beta_{n'+1}|1_{n'}\rangle - \langle 0|B_n \beta_{n'-1}|1_{n'}\rangle\big)\Big\} =$$
$$= \sum_n A_n^* A_n \chi(\beta_{n+1} - \beta_{n-1})$$

Iz I, II, III sledi:

$$\langle \Psi(t)|H|\Psi(t)\rangle = \sum_n A_n^*\big[(\mathcal{E}_0 + W)A_n - J(A_{n+1} + A_{n-1}) + \chi A_n(\beta_{n+1} - \beta_{n-1})\big] \tag{2.3}$$

gde je $$W = \frac{1}{2}\sum_n\Big[\frac{1}{M}\Pi_n^2 + \mathcal{H}(\beta_n - \beta_{n-1})^2\Big]$$

Uzimajući srednju vrednost Hamiltonijana za Hamiltonovu funkciju i smatrajući A_n i $i\hbar A_n^*$ kao i β_n i Π_n za konjugovane parove kanonskih promenljivih, nalaze se Hamiltonove jednačine:

$$i\hbar \frac{\partial A_n}{\partial t} = [\mathcal{E}_0 + W + \chi(\beta_{n+1} - \beta_{n-1})]A_n - J(A_{n+1} + A_{n-1}) \quad (2.4.a)$$

$$\Pi_n = M \frac{\partial \beta_n}{\partial t} \quad (2.4.b)$$

$$-\dot{\Pi}_n = \frac{\partial H}{\partial \beta_n} = \sum_k \left\{ |A_k|^2 \frac{\partial W}{\partial \beta_n} + \chi |A_k|^2 \left(\frac{\partial \beta_{k+1}}{\partial \beta_n} - \frac{\partial \beta_{k-1}}{\partial \beta_n} \right) \right\} = \sum_k |A_k|^2 \{ \varkappa (2\beta_n - \beta_{n-1} - \beta_{n+1}) + \chi \times (\delta_{k+1,n} - \delta_{k-1,n}) \}$$

(Jer je $\frac{\partial W}{\partial \beta_n} = \frac{\varkappa}{2} \sum_k \frac{\partial}{\partial \beta_n} (\beta_k^2 - 2\beta_k \beta_{k-1} + \beta_{k-1}^2) = \frac{\varkappa}{2} \sum_k \{ 2\beta_k \delta_{k,n} - 2(\delta_{kn}\beta_{k-1} + \beta_k \delta_{k-1,n}) + 2\beta_{k-1}\delta_{k-1,n} \} = \varkappa(2\beta_n - \beta_{n-1} - \beta_{n+1})$)

Konačno se dobija:

$$M \frac{\partial^2 \beta_n}{\partial t} + \varkappa(2\beta_n - \beta_{n+1} - \beta_{n-1}) = \chi(|A_{n+1}|^2 - |A_{n-1}|^2) \quad (2.4.c)$$

Pri prelasku na kontinuum koriste se transformacije:

$$A_n(t) \to \phi(t, z) \exp\left[i\left(kz - \frac{Et}{\hbar}\right)\right] \quad , \; z = na$$

$$\beta_n(t) \to \beta(t, z)$$

Odatle sledi uslov : $\frac{1}{a} \int \phi^2(z,t)\, dz = 1$

Osim toga pošto važi:

$$A_{n\pm1}(t) \to \exp\left\{i\left[k(z \pm a) - \frac{Et}{\hbar}\right]\right\} \times \left(1 \pm a\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{2}a^2\frac{\partial^2}{\partial z^2} \cdots\right) \times \phi(z,t)$$

$$\beta_{n\pm1}(t) \to \left(1 \pm a\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{2}a^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \cdots\right)\beta(z,t) \quad (2.5)$$

moguće je Hamiltonove jednačine (2.4) napisati u drugačijem obliku uzimajući u razvoju (2.5) samo prva tri člana:

a.) $$i\hbar \frac{\partial A_n}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left\{\phi e^{i(kz - Et/\hbar)}\right\} = i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} e^{i(kz - Et/\hbar)} + E\phi e^{i(kz - Et/\hbar)}$$

b.) $$\{\mathcal{E}_0 + W + \chi(\beta_{n+1} - \beta_{n-1})\}A_n - J(A_{n+1} + A_{n-1}) = \{\mathcal{E}_0 + W + \chi\left(\beta + a\frac{\partial\beta}{\partial z} + \frac{1}{2}a^2\frac{\partial^2\beta}{\partial z^2} - \beta + a\frac{\partial\beta}{\partial z} - \frac{1}{2}a^2\frac{\partial^2\beta}{\partial z^2}\right)\} \times$$
$$\times \phi e^{i(kz - Et/\hbar)} - J\left\{e^{i(k(z+a) - Et/\hbar)}\left(\phi + a\frac{\partial\phi}{\partial z} + \frac{1}{2}a^2\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right) + e^{i(k(z-a) - Et/\hbar)}\left(\phi - a\frac{\partial\phi}{\partial z} + \frac{1}{2}a^2\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right)\right\} =$$
$$= (\mathcal{E}_0 + W - 2\chi\rho)\phi e^{i(kz - Et/\hbar)} - 2J e^{i(kz - Et/\hbar)} \times$$
$$\times \left(\phi \cos ka + ai\frac{\partial\phi}{\partial z}\sin ka + \frac{1}{2}a^2\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\cos ka\right)$$

Izjednačavajući realni i imaginarni deo od a) i b) dobijaju se jednačine:

$$\hbar \frac{\partial \phi(z,t)}{\partial t} = -2aJ\frac{\partial\phi}{\partial z}\sin ka \qquad (2.6.a)$$

$$\left[\Lambda + a^2\tilde{J}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2\chi\rho(z,t)\right]\phi(z,t) = 0 \qquad (2.6.b)$$

$$\tilde{J} = J\cdot\cos ka \quad , \quad \rho(z,t) = -a\frac{\partial}{\partial z}\beta(z,t)$$

Slično se dobija i treća jednačina iz (2.4.c):

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - V_0^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\rho(z,t) = -\frac{2\chi V_0^2}{\varkappa}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\phi^2(z,t) \qquad (2.6.c)$$

$$V_0 = a\sqrt{\varkappa/M}$$

Tada je ukupna energija solitona:

$$E = \Lambda + \mathcal{E}_0 + W - 2\tilde{J} \qquad (2.7)$$

Zbog translacione invarijantnosti operatora (2.1) stacionarno rešenje sistema jednačina (2.6) može se tražiti u vidu pobudjenja koje se prostire konstantnom brzinom V. Tada koordinate z i t postaju:

$$\xi = z - z_0 - Vt$$

tj mogu se izraziti preko nove promenljive, a sistem jednačina (2.6) se prevodi u oblik:

$$\left(\hbar V - 2aJ \sin ka\right) \frac{d\phi}{d\xi} = 0$$

$$\left[\Lambda + a^2 \tilde{J} \frac{d^2}{d\xi^2} + 2\chi \rho(\xi)\right] \Phi(\xi) = 0 \qquad (2.8)$$

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

$$s = V/V_0$$

Unutarmolekularna pobudjenja umanjuju ravnotežno rastojanje medju molekulima niza pa je na osnovu treće jednačine (2.8) funkcija ρ izabrana u obliku:

$$\rho(\xi) = \frac{2\chi \Phi^2(\xi)}{\varkappa(1 - s^2) \cdot a} \qquad (2.8.a)$$

Zamenjujući takvo ρ u drugu jednačinu (2.8) dobija se nelinearna Schrodinger-ova jednačina:

$$\left[\Lambda + a^2 \tilde{J} \frac{d^2}{d\xi^2} + G \Phi^2(\xi)\right] \Phi(\xi) = 0 \qquad (2.9)$$

gde je parametar nelinearnosti:

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

Kada je brzina prostiranja pobudjenja veća od brzine zvuka ($s^2 > 1$) tada je $G < 0$. U tom slučaju jednačina niza nema stacionarno rešenje/ rešenje je tada u obliku ravnog talasa koje zadovoljava prvu jednačinu iz (2.8) i takva stanja se zovu eksitoni/. U slučaju $S^2<1$ parametar nelinearnosti je pozitivan i za $J>0$, iz uslova normiranja:

$$\frac{1}{a}\int \phi^2(z,t)\,dz=1$$

se dobija da je rešenje jednačine (2.9) oblika:

$$\phi(\xi)=\frac{\sqrt{aQ}}{\sqrt{2}\,ch\,Q\xi} \qquad (2.10)$$

gde je $Q=\frac{G}{4aJ}$

Pobudjena koja imaju takvu amplitudu talasne funkcije se zovu solitoni.

Zamenjujući (2.lo) u (2.8.a) nalazi se funkcija:

$$\rho(\xi)=\frac{aQ\chi}{\varkappa(1-S^2)\,ch^2 Q\xi}$$

koja karakteriše smanjenje rastojanja izmedju molekula u oblasti gde se nalazi soliton.

Bez dokazivanja će biti navedene neke osobine solitona; pri malim brzinama solitona, ukupna energija mu se može napisati u vidu: $E_{sol}(V)=E_{sol}(0)+\frac{1}{2}m_{sol}V^2$ gde je m_{sol} masa solitona koja je u nekim nizovima (pri $V_0<V_g$, V_g odredjuje maksimalnu grupnu brzinu eksitona) znatno veća od mase eksitona. Ukoliko se kreću brzinom manjom od brzine zvuka u lancu ne odaju fonone tj kinetička energija se ne pretvara u toplotno kretanje.Forma solitona data izrazom (2.lo) ne zavisi od načina njihovog obrazovanja, ona pokazije samousaglašenost (više o solitonskim osobinama videti u /1/).

KRITIKA DAVIDOVLJEVE ANALIZE

U prethodnoj glavi su dati rezultati Davidovljeve analize. Pošto su vremena života eksitona suviše kratka da bi oni mogli biti nosioci energije kroz niz na većim rastojanjima, Davidov je pretpostavio da su to solitoni. Pri tome je za funkciju stanja uzeo izraz(2.2).

Medjutim pokazalo se da talasna funkcija koherentnog stanja (2.2) ne zadovoljava Schrodingerovu jednačinu za oblik Hamiltonijana (2.1).

Da bi se to pokazalo Hamiltonijan se prethodno prevodi u "n-q" prostor radi lakšeg dokaza (inače je to moguće uraditi i u "n" i u "q" prostoru). Pri tome će se u interakcionom delu Hamiltonijana dodati još jedan član odgovoran za tzv slabu interakciju oblika:

$$H'_{int} = \chi_2 \sum_n (u_{n+1} - u_n)(B_n^+ B_{n+1} + B_{n+1}^+ B_n)$$

Prevodjenje Hamiltonijana iz "n" u "q" prostor se vrši pomoću Furije transformacije za operatore položaja i impulsa:

$$u_n = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2MN\omega_q}\right)^{1/2} (b_{-q}^+ + b_q)\, e^{iqna}$$

$$P_n = i \sum_q \left(\frac{\hbar\omega_q M}{2N}\right)^{1/2} (b_{-q}^+ - b_q)\, e^{iqna}$$

U tom slučaju Hamiltonijan ima oblik:

$$H = H_{exc} + H_{int} + H_{ph} \tag{3.1}$$

$$H_{exc} = \mathcal{E}_0 \sum_n B_n^+ B_n - J \sum_n B_n^+ (B_{n+1} + B_{n-1})$$

$$H_{int} = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{nq} \left[F_{qn} B_n^+ B_n + G_{qn} (B_{n+1}^+ B_n + B_n^+ B_{n+1}) \right] \times$$

$$\times (b_q + b_{-q}^+)$$

$$H_{ph} = \sum_q \hbar \omega_q b_q^+ b_q + E_0$$

gde su:
$$F_{qn} = 2 i \chi_1 \left(\frac{\hbar}{2M\omega_q} \right)^{1/2} \sin qa \; e^{iqna}$$

$$G_{qn} = 2 i \chi_2 \left(\frac{\hbar}{2M\omega_q} \right)^{1/2} \sin \frac{qa}{2} \; e^{iq(n+\frac{1}{2})a}$$

jaka odnosno slaba interakcija.

Talasna funkcija se uzima u obliku:

$$|\Psi\rangle = \sum_n A_n B_n^+ |0\rangle_{ex} |\alpha\rangle \tag{3.2}$$

$$|\alpha\rangle = e^{-\hat{S}} |0\rangle_{ph} \quad , \quad \hat{S} = \sum_q (\alpha_q^* b_q - \alpha_q b_q^+)$$

Posebno se nalazi rešenje uvrštavanjem (3.2) u Schrodinger-ovu jednačinu za levu i desnu stranu:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \sum_n \dot{A}_n B_n^+ |0\rangle |\alpha\rangle + \sum_n A_n B_n^+ |0\rangle \frac{\partial |\alpha\rangle}{\partial t} \quad ,$$

$$\frac{\partial |\alpha\rangle}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (e^{-S} |0\rangle) = \frac{\partial e^{-S}}{\partial t} |0\rangle + e^{-S} \frac{\partial |0\rangle}{\partial t} =$$

$$= \frac{\partial e^{-S}}{\partial t} |0\rangle + \frac{1}{i\hbar} e^{-S} E_0 |0\rangle$$

jer je: $i\hbar \frac{\partial|0\rangle}{\partial t} = H|0\rangle = E_0|0\rangle$

Da bi se našao parcijalni izvod od e^{-s} po vremenu koristi se identitet:

$$e^{-\hat{s}} = e^{-\frac{1}{2}\sum_q |\alpha_q|^2} e^{\sum \alpha_q b_q^+} e^{-\sum \alpha_q^* b_q}$$

Konačno se dobija izraz:

$$i\hbar \frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t} = i\hbar \sum_n \dot{A}_n B_n^+ |0\rangle|\alpha\rangle + \sum_n A_n B_n^+ |0\rangle \sum_q \frac{i\hbar}{2} \times \tag{3.3}$$

$$\times (\dot{\alpha}_q \alpha_q^* - \dot{\alpha}_q^* \alpha_q)|\alpha\rangle + \sum_n A_n B_n^+ |0\rangle \sum_q i\hbar \dot{\alpha}_q e^{-s} b_q^+ |0\rangle +$$

$$+ E_0|\Psi\rangle$$

Dejstvo Hamiltonijana na funkciju (3.2) daje:

$$H|\Psi\rangle = \mathcal{E}_0 \sum_{nn'} A_{n'} B_n^+ B_n B_{n'}^+ |0\rangle_{ex} |\alpha\rangle - J \sum_{nn'} A_{n'} B_n^+ (B_{n+1} +$$

$$B_{n-1}) B_{n'}^+ |0\rangle|\alpha\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{nqn'} A_{n'} \{ F_{qn} B_n^+ B_n B_{n'}^+ |0\rangle + G_{qn} \times$$

$$\times (B_{n+1}^+ B_n B_{n'}^+ + B_n^+ B_{n+1} B_{n'}^+)|0\rangle \} (b_q + b_{-q}^+)|\alpha\rangle +$$

$$\sum_{qn} A_n \hbar\omega_q b_q^+ b_q B_n^+ |0\rangle|\alpha\rangle + E_0|\Psi\rangle \tag{3.4}$$

Pošto je $B_n B_{n'}^+ = \delta_{nn'} + B_{n'}^+ B_n$ i $B_n|0\rangle_{ex} = 0$

dobija se prvi i drugi član:

$$\sum_n \mathcal{E}_0 A_n B_n^+ |0\rangle|\alpha\rangle - J \sum_n (A_{n+1} + A_{n-1}) B_n^+ |0\rangle|\alpha\rangle \tag{3.5}$$

Pomoću izraza za unitarnu transformaciju operatora b_q^+ i b_q sa e^{-s} koja "translira" operatore dobija se:

$$b_q^+ e^{-s} = e^{-s} b_q^+ + \alpha_q^* e^{-s}$$
$$b_q e^{-s} = e^{-s} b_q + \alpha_q e^{-s} \tag{3.6}$$

Pošto je $b_q|\alpha\rangle = \alpha_q|\alpha\rangle$ uz korištenje prethodno navedene komutacione relacije za boze operatore i cikličnih graničnih uslova dobija se za treći član izraz:

$$\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{nq} F_{nq} A_n B_n^+|0\rangle(\alpha_q+\alpha_{-q}^*)|\alpha\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{nq}(G_{q,n-1}A_{n-1} + G_{qn}A_{n+1})B_n^+|0\rangle(\alpha_q+\alpha_{-q}^*)|\alpha\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{nq} F_{n,-q}A_n B_n^+|0\rangle \times e^{-S} b_q^+|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{nq}(G_{n-1,-q}A_{n-1} + G_{n,-q}A_{n+1})B_n^+|0\rangle e^{-S} \times b_q^+|0\rangle \tag{3.7}$$

Koristeći izraz (3.6) za četvrti član u izrazu (3.4) se dobija:

$$\sum_n A_n B_n^+|0\rangle \sum_q \hbar\omega_q|\alpha_q|^2|\alpha\rangle + \sum_n A_n B_n^+|0\rangle \sum_q \hbar\omega_q \times \alpha_q e^{-S} b_q^+|0\rangle \tag{3.8}$$

Uvrštavanjem (3.5), (3.7) i (3.8) u (3.4) dobija se konačno:

$$H|\Psi\rangle = \sum_n \varepsilon_0 A_n B_n^+|0\rangle|\alpha\rangle - J\sum_n (A_{n+1}-A_{n-1})B_n^+|0\rangle \times |\alpha\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{nq} F_{nq}A_n B_n^+|0\rangle(\alpha_q+\alpha_{-q}^*)|\alpha\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{nq}(G_{q,n-1} \times A_{n-1} + G_{qn}A_{n+1})B_n^+|0\rangle(\alpha_q+\alpha_{-q}^*)|\alpha\rangle + \sum_n A_n B_n^+|0\rangle \times \sum_q \hbar\omega_q|\alpha_q|^2|\alpha\rangle + E_0|\Psi\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{nq} F_{n,-q}A_n B_n^+|0\rangle e^{-S} \times b_q^+|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{nq}(G_{n-1,-q}A_{n-1} + G_{n,-q}A_{n+1})B_n^+|0\rangle \times e^{-S} b_q^+|0\rangle + \sum_n A_n B_n^+|0\rangle \sum_q \hbar\omega_q \alpha_q e^{-S} b_q^+|0\rangle \tag{3.9}$$

Izjednačavajući izraze (3.3) i (3.9) i množeći sleva sa $\langle o| B_n \langle \alpha|$ kao projekcije na dati pravac se dobija izraz:

$$i\hbar \dot{A}_n = [\mathcal{E}_o + \sum_q \hbar\omega_q |\alpha_q|^2 - \frac{i\hbar}{2}\sum_q (\dot{\alpha}_q \alpha_q^* - \dot{\alpha}_q^* \alpha_q)] A_n - J(A_{n+1} +$$

$$+ A_{n-1}) + \frac{A_n}{\sqrt{N}} \sum_q F_{nq}(\alpha_q + \alpha_{-q}^*) + \frac{A_{n-1}}{\sqrt{N}} \sum_q G_{n-1,q}(\alpha_q + \alpha_{-q}^*) +$$

$$\frac{A_{n+1}}{\sqrt{N}} \sum_q G_{nq}(\alpha_q + \alpha_{-q}^*) \qquad (3.10)$$

Projektovanjem na pravac $\langle o|B_n \langle o| b_q e^3$ se dobija:

$$i\hbar A_n \dot{\alpha}_q = A_n \hbar\omega_q \alpha_q + \frac{A_n}{\sqrt{N}} F_{n,-q} + \frac{A_{n-1}}{\sqrt{N}} G_{n-1,-q} + \frac{A_{n+1}}{\sqrt{N}} G_{n,-q} \qquad (3.11)$$

Množenjem (3.11) sa A_n^* i sumiranjem po "n" dobija se Hamiltonova jednačina (jer bi se isto dobilo množeći (3.9) sleva sa $\langle \Psi|$ i diferenciranjem po $i\hbar\alpha_q^*$):

$$i\hbar \dot{\alpha}_q = \hbar\omega_q \alpha_q + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n F_{n,-q}|A_n|^2 + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n A_n^* (G_{n-1,-q} A_{n-1} + G_{n,-q} A_{n+1})$$

Za slučaj odsustva slabe interakcije ($G=0$) zadnji izraz dobija oblik:

$$i\hbar \dot{\alpha}_q = \hbar\omega_q \alpha_q + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n F_{n,-q}|A_n|^2 \qquad (3.11.a)$$

Ako se (3.11) podeli sa A_n, (za $G=0$) i uporedi sa (3.11a) dobija se jednakost (vidi /3/):

$$\sum_{n'} F_{n',-q}|A_{n'}|^2 = F_{n,-q} \qquad (3.11.b)$$

odakle sledi da je $|A_{n'}|^2 = \delta_{nn'}$ što je kontradikcija jer "n" može biti proizvoljno.

Odatle sledi zaključak da funkcija $|\Psi\rangle$ nije rešenje Schrodingerove jednačine. Naime za Davidovsku funkciju pojavljuje se dopunski uslov (3.11) da bi Schrodingerova jednačina bila zadovoljena, a on mora biti usaglašen sa Hamiltonovim jednačinama što nije tako.

Pošto je pokazano da (3.2) nije rešenje Schrodingerove jednačine za Hamiltonijan (3.1), prethodni rezultati će se iskoristiti za nalaženje oblika Hamiltonijana za koga će (3.2) biti rešenje.

Ako se $|\Psi\rangle$ napiše u obliku proizvoda $|A\rangle|\alpha\rangle$, uvrsti u Schrodingerovu jednačinu:

$$i\hbar \frac{\partial |A\rangle}{\partial t}|\alpha\rangle + i\hbar |A\rangle \frac{\partial|\alpha\rangle}{\partial t} = H|\alpha\rangle|A\rangle \tag{3.12}$$

i projektuje na pravac $|\alpha\rangle$, dobija se:

$$i\hbar \frac{\partial |A\rangle}{\partial t} = H_{exc}|A\rangle + \langle\alpha|H_{int}|\alpha\rangle|A\rangle + \left[\mathcal{H}_{ph} - i\hbar \times \langle\alpha|\frac{\partial|\alpha\rangle}{\partial t}\right]|A\rangle \tag{3.13}$$

$$, \quad \mathcal{H}_{ph} = \langle\Psi|H_{ph}|\Psi\rangle = \langle\alpha|H_{ph}|\alpha\rangle$$

, a projektovanjem na pravac $|A\rangle$:

$$i\hbar \frac{\partial|\alpha\rangle}{\partial t} = H_{ph}|\alpha\rangle + \langle A|H_{int}|A\rangle|\alpha\rangle + \left[\mathcal{H}_{exc} - i\hbar \times \langle A|\frac{\partial|A\rangle}{\partial t}\right]|\alpha\rangle \tag{3.14}$$

Množeći (3.14) sleva sa $\langle\alpha|$ dobija se:

$$\mathcal{H}_{exc} - i\hbar\langle A|\frac{\partial|A\rangle}{\partial t} = i\hbar\langle\alpha|\frac{\partial|\alpha\rangle}{\partial t} - \mathcal{H}_{ph} - \langle\Psi|H_{int}|\Psi\rangle \tag{3.15}$$

Zamenom (3.15) u (3.13) i (3.14) dobijaju se izrazi:

$$i\hbar \frac{\partial |A\rangle}{\partial t} = H_{exc}|A\rangle + \langle \alpha | H_{int} | \alpha\rangle |A\rangle + \Big[i\hbar \langle A | \frac{\partial |A\rangle}{\partial t} -$$

$$- \mathcal{H}_{exc} - \mathcal{H}_{int} \Big] |A\rangle \qquad (3.16)$$

$$i\hbar \frac{\partial |\alpha\rangle}{\partial t} = H_{ph}|\alpha\rangle + \langle A | H_{int} | A\rangle |\alpha\rangle + \Big[i\hbar \langle \alpha | \frac{\partial |\alpha\rangle}{\partial t} -$$

$$- \mathcal{H}_{ph} - \mathcal{H}_{int} \Big] |\alpha\rangle \qquad (3.17)$$

$$\mathcal{H}_{exc} = \langle \Psi | H_{exc} | \Psi \rangle = \langle A | H_{exc} | A\rangle$$

Pošto je na osnovu prethodnih rezultata:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |A\rangle = \sum_n i\hbar \dot{A}_n B_n^+ |0\rangle \qquad (3.17.a)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha\rangle = \frac{i\hbar}{2} \sum_q (\dot{\alpha}_q \alpha_q^* - \dot{\alpha}_q^* \alpha_q) |\alpha\rangle + i\hbar \sum_q \dot{\alpha}_q \times$$

$$\times e^{-S} b_q^+ |0\rangle \qquad (3.17.b)$$

, uz korišćenje izraza (3.5) i (3.7) pomnoženog sleva sa $\langle \alpha |$ (za $\sigma = 0$) i zamene u (3.13), dobija se:

$$i\hbar \sum_n \dot{A}_n B_n^+ |0\rangle = \sum_n \Big[\mathcal{E}_0 + \mathcal{H}_{ph} - i\hbar \langle \alpha | \frac{\partial |\alpha\rangle}{\partial t} \Big] \cdot A_n B_n^+ |0\rangle -$$

$$- J \sum_n (A_{n+1} + A_{n-1}) B_n^+ |0\rangle + \sum_{nq} \hbar \omega_q (X_n^q \alpha_q^* + X_n^{q*} \alpha_q) \times$$

$$\times A_n B_n^+ |0\rangle \qquad (3.18)$$

(Uvedena je smena $X_n^q = \frac{F_{n,-q}}{\sqrt{N}\,\hbar\omega_q}$ odakle sledi da je $X_n^{-q} = X_n^{q*}$ na osnovu oblika funkcije F_{nq})

Analogno, zamenom (3.17.b) u (3.14) i množenjem (3.7) sleva sa $\langle A|$ i zamenom u (3.14), dobija se:

$$\frac{i\hbar}{2}\sum_q(\dot{\alpha}_q\alpha_q^* - \dot{\alpha}_q^*\alpha_q)|\alpha\rangle + i\hbar\sum_q\dot{\alpha}_q e^{-S}b_q^+|0\rangle = [\mathcal{H}_{ph} +$$

$$+ \mathcal{H}_{int} + \mathcal{H}_{exc} - i\hbar\langle A|\frac{\partial|A\rangle}{\partial t}]|\alpha\rangle + \sum_q\hbar\omega_q\alpha_q e^{-S}b_q^+|0\rangle +$$

$$+ \sum_{n,q}\hbar\omega_q|A_n|^2X_n^q e^{-S}b_q^+|0\rangle \qquad (3.19)$$

(Iskorišteni su i izrazi:

$$H_{ph}|\alpha\rangle = \sum_q\hbar\omega_q|\alpha_q|^2|\alpha\rangle + \sum_q\hbar\omega_q\alpha_q e^{-S}b_q^+|0\rangle = \mathcal{H}_{ph}|\alpha\rangle +$$

$$+ \sum_q\hbar\omega_q\alpha_q e^{-S}b_q^+|0\rangle$$

jer je $\langle\alpha|e^{-S}b_q^+|0\rangle = 0$ na osnovu (3.6))

Iz (3.18) sledi:

$$i\hbar\dot{A}_n = [\mathcal{E}_0 + \mathcal{H}_{ph} - \frac{i\hbar}{2}\sum_q(\dot{\alpha}_q\alpha_q^* - \dot{\alpha}_q^*\alpha_q)]A_n + \sum_q\hbar\omega_q \times$$

$$\times(X_n^q\alpha_q^* + X_n^{q*}\alpha_q)A_n - J(A_{n+1} + A_{n-1}) \qquad (3.20)$$

Množeći (3.19) sleva sa $\langle 0|b_q e^S$ dobija se:

$$i\hbar\dot{\alpha}_q = \hbar\omega_q\alpha_q + \sum_n|A_n|^2X_n^q\hbar\omega_q$$

tj. izraz (3.11.a) još jednom.

Ako (3.13) i (3.14) zamenimo u (3.12) dobijamo:

$$H_{exc}|\Psi\rangle + \langle\alpha|H_{int}|\alpha\rangle|\Psi\rangle + [\mathcal{H}_{ph} - i\hbar\langle\alpha|\frac{\partial|\alpha\rangle}{\partial t}]|A\rangle +$$

$$+ H_{ph}|\Psi\rangle + \langle\ \ |H_{int}|A\rangle|\Psi\rangle + [\mathcal{H}_{exc} - i\hbar\langle A|\frac{\partial|A\rangle}{\partial t}]|\Psi\rangle =$$

$$= H|\Psi\rangle \qquad (3.21)$$

Ako se iskoristi izraz (3.15), (3.21) se može napisati u obliku:

$$[H_{exc}+H_{ph}+(\langle\alpha|H_{int}|\alpha\rangle+\langle A|H_{int}|A\rangle-\mathcal{H}_{int})]|\Psi\rangle =$$

$$=H|\Psi\rangle \tag{3.22}$$

tj. dobilo se da je traženi oblik interakcionog dela Hamiltonijana u (3.1) potrebno da je jednak izrazu u maloj zagradi da bi Davidovska funkcija zadovoljavala Schrodingerovu jednačinu. Odatle i sledi uslov da je Davidovska funkcija rešenje Schrodingerove jednačine za pretpostavljeni oblik Hamiltonijana(3.1) :

$$H^{0}_{int}|\Psi\rangle=[\langle\alpha|H_{int}|\alpha\rangle+\langle A|H_{int}|A\rangle-\mathcal{H}_{int}]|\Psi\rangle =$$

$$=H_{int}|\Psi\rangle \tag{3.23}$$

Oblik pojedinih članova je:

$$\langle\alpha|H_{int}|\alpha\rangle=\sum_{nq}B_n^+B_n\hbar\omega_q(X_n^q\alpha_q^*+X_n^{q*}\alpha_q)$$

$$\langle A|H_{int}|A\rangle=\sum_{nq}|A_n|^2\hbar\omega_q(X_n^q b_q^+ +X_n^{q*}b_q) \tag{3.24}$$

$$\mathcal{H}_{int}=\langle\Psi|H|\Psi\rangle=\sum_{nq}|A_n|^2\hbar\omega_q(X_n^q\alpha_q^*+X_n^{q*}\alpha_q)$$

Zamenom (3.24) u (3.23) na osnovu prethodnog dobija se izraz :

$$\sum_{nq'}\hbar\omega_{q'}A_n(X_n^{q'}\alpha_{q'}^*+X_n^{q*}\alpha_{q'})B_n^+|0\rangle|\alpha\rangle+\sum_{nn'q'}A_{n'}\times$$

$$B_n^+|0\rangle|A_{n'}|^2\hbar\omega_{q'}(X_{n'}^{q'}\alpha_{q'}^*+X_{n'}^{q'*}\alpha_{q'})|\alpha\rangle-\mathcal{H}_{int}\times$$

$$\sum_n A_n B_n^+|0\rangle|\alpha\rangle + |A\rangle \sum_{n'q'} |A_{n'}|^2 \hbar\omega_{q'} X_{n'}^{q'} e^{-S} b_{q'}^+ \times$$

$$|0\rangle = \sum_{nq'} A_n \hbar\omega_{q'} (X_n^{q'}\alpha_{q'}^* + X_n^{q'*}\alpha_{q'}) B_n^+|0\rangle|\alpha\rangle +$$

$$\sum_{nq'} A_n B_n^+|0\rangle \hbar\omega_q X_n^{q'} e^{-S} b_{q'}^+|0\rangle \qquad (3.25)$$

Projektovanjem relacije (3.25) na pravce $|\alpha\rangle B_n^+|0\rangle$ i $|A\rangle e^{-S} b_q^+|0\rangle$ dobijaju se identiteti:

$$A_n(X_n^q\alpha_q^* + X_n^{q*}\alpha_q) = A_n(X_n^q\alpha_q^* + X_n^{q*}\alpha_q)$$

$$\sum_n |A_n|^2 X_n^q = \sum_n |A_n|^2 X_n^q$$

Medjutim projektovanjem (3.25) na "podpravac" $B_n^+|0\rangle e^{-S} \times b_q^+|0\rangle$ pravca $|A\rangle e^{-S} b_q^+|0\rangle$ dobija se izraz:

$$\sum_{n'} |A_{n'}|^2 X_{n'}^q = X_n^q$$

tj izraz (3.11.b) još jednom. Potrebno je reći da H_{int}^D zavisi od vremena jer sadrži funkcije $|A_n|^2$, α_q, α_q^* koje zavise od vremena.

Dalje će se naći komutator operatora H i $H_0 = H_{ph} + H_{exc} + H_{int}^D$

$$[H, H_0] = -J \sum_{nn'q} \hbar\omega_q [(B_n^+B_{n+1} + B_{n+1}^+B_n), B_{n'}^+B_{n'}] \times$$

$$(X_{n'}^q\alpha_q^* + X_{n'}^{q*}\alpha_q) + \sum_{q'nq} \hbar\omega_q\omega_{q'} [b_{q'}^+b_{q'}, (X_n^q b_q^+ +$$

$$X_n^{q*}b_q)]|A_n|^2 - J \sum_{nn'q} \hbar\omega_q (X_n^q b_q^+ + X_n^{q*}b_q)[B_n^+B_n,$$

$$(B_{n'}^+B_{n'+1} + B_{n'+1}^+B_{n'})] + \sum_{nn'qq'} \hbar^2\omega_q\omega_{q'} B_n^+B_n|A_{n'}|^2 \times$$

$$[(X_n^q b_q^+ + X_n^{q*} b_q), (X_{n'}^{q'} b_{q'}^+ + X_{n'}^{q'*} b_{q'})] + \sum_{nqq'} \hbar^2 \omega_q \times$$

$$\omega_{q'} B_n^+ B_n [(X_n^q b_q^+ + X_n^{q*} b_q), b_{q'}^+ b_q]$$

Posle sredjivanja se dobija izraz:

$$[H, H_D] = -J \sum_{n'q} \hbar \omega_q (X_{n'}^q \alpha_q^* + X_{n'}^{q*} \alpha_q)(B_{n'+1}^+ B_{n'} + B_{n'-1}^+ \times$$

$$B_{n'} - B_{n'}^+ B_{n'-1} - B_{n'}^+ B_{n'+1}) - J \sum_{nq} \hbar \omega_q (X_n^q b_q^+ + X_n^{q*} b_q) \times$$

$$(B_n^+ B_{n+1} - B_{n-1}^+ B_n + B_n^+ B_{n-1} - B_{n+1}^+ B_n) + \sum_{nq} (\hbar \omega_q)^2 \times$$

$$(B_n^+ B_n - |A_n|^2)(X_n^{q*} b_q - X_n^q b_q^+) + \sum_{nn'q} (\hbar \omega_q)^2 B_n^+ B_n \times$$

$$|A_{n'}|^2 (X_n^{q*} X_{n'}^q - X_n^q X_{n'}^{q*})$$

Ako se nadje srednja vrednost komutatora u stanju $|\Psi_D\rangle$ dobiće se da je ono jednako nuli a odatle na osnovu Hajzenbergove jednačine kretanja za operator H:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi_D | H | \Psi_D \rangle = \langle \Psi_D | [H, H_D] | \Psi_D \rangle = 0$$

sledi: $\mathcal{H} = \text{const}$.

Taj rezultat se mogao i očekivati jer energija ostaje u sistemu (lancu).

Pošto Hamiltonijan H_D zavisi eksplicitno od vremena rešenje Schrodingerove jednačine se dobija metodom sukcesivnih aproksimacija i može se formalno napisati u obliku:

$$|\Psi_D(t)\rangle = \hat{T}\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\int_0^t H_D(t')dt'\right)|\Psi_D(0)\rangle = |A\rangle|\alpha\rangle$$

Talasna funkcija (nepoznata) koja je rešenje Schrodingerove jednačine za Hamiltonijan (3.1) se može formalno napisati u obliku:

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{1}{i\hbar}Ht\right)|\Psi(0)\rangle$$

ali ne i u obliku proizvoda $|A\rangle|\alpha\rangle$ zbog člana H_{wt} u H .

ZAKLJUČAK

U ovom radu se analiziraju rezultati Davidova vezani za prostiranje solitonskih talasa u molekularnim lancima. Konkretno, provereno je da li Davidovska funkcija zadovoljava Schrodingerovu jednačinu za izabrani oblik Hamiltonijana. Pokazalo se da ne zadovoljava. Dalje je nadjen efektivni Hamiltonijan (odnosno efektivna interakcija) koji bi trebalo da ima da bi Davidovska funkcija bila rešenje Schrodingerove jednačine. Ustanovljeno je da on zavisi eksplicitno od vremena ali da su srednje vrednosti efektivnog Hamiltonijana i Hamiltonijana datog izrazom (3.1) jednake; medjutim da bi se utvrdilo da li se javljaju solitoni bilo bi potrebno naći raspodelu gustine energije tj kako se menja količina energije u pojedinim delovima lanca sa vremenom. Da bi se utvrdilo da li Davidovska funkcija ipak opisuje solitone uz zadovoljavajuću aproksimaciju, trebalo bi proceniti veličinu greške koja se time čini što prevazilazi okvir ovoga rada.

LITERATURA

1./ A.S.Davidov: Solitoni v kvaziodnomernih molekularnih strukturax (U.F.N. 38(4), 603-641 (1982))

2./ A.S.Davidov: Kvantova mehanika (Moskva, 1973)

3./ M.Škrinjar, D. Kapor, S. Stojanović: Critical analisis of Davidov solitons (sekcija za fiziku kondenzovane materije Evropskog fizičkog društva; Pisa, april 1987)

4./ D.W. Brown, B.J. West, K. Lindenberg: Davydov solitons; New resultats at variance with standard derivations, Phys. Rev. A. 33 4110 (1986)

5./ Bratislav Tošić : Statistička fizika (Novi Sad, 1978)

6./ Slavka Miličević: Superfluidnost optičkih pobidjenja u kristalima sa dve podrešetke (diplomski rad, N.Sad 1978)

7./ Vučurević Vasa: Solitoni u jednodimenzionalnim feromagneticima sa planarnom anizotropijom (diplomski rad, N.Sad 1985)

8./ A.R. Bishop, J.A. Krumhansl, S.E. Trulinger: Solitons in condensed matter: a paradigm, physica D 1, 44 (1984).