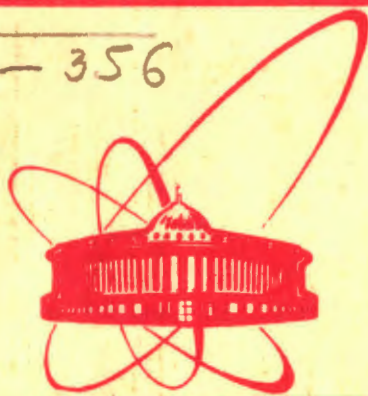


Ф-356



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

2361/2-81

18/5-81

P17-81-100

В.К.Федянин, Л.В.Якушевич

ЧАСТИЦЕПОДОБНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ
В МОДЕЛЬНОЙ ПОЛИПЕПТИДНОЙ ЦЕПОЧКЕ

Направлено в "International Journal
of Quantum Chemistry"

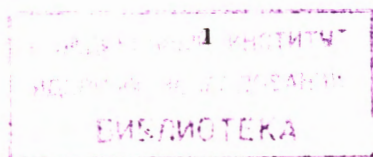
1981

I. Задачи, связанные с изучением особенностей движения возбуждений в биомолекулах, представляют собой одно из наиболее интересных приложений физики одномерных систем.

Важность рассмотрения этих задач не вызывает сомнений. Миграция энергии вдоль белковых молекул часто является существенным условием протекания многих биологических процессов.

Особое внимание исследователей привлекает необычайно высокая эффективность передачи энергии возбуждения в биомолекулах. Последние достижения нелинейной физики позволили по-новому осветить этот вопрос и связать малые потери при передаче энергии с особенностями поведения частицеподобных решений нелинейных уравнений движения возбуждений в биомолекулах.

Один из основных подходов к решению этих задач состоит в построении и исследовании достаточно простых и доступных математической обработке моделей белковых молекул. В нашей работе изучается простая модель α -спиральной полипептидной цепи. Мы моделируем полипептидную цепь одномерной кристаллической решеткой с тремя "молекулами" в элементарной ячейке и с взаимодействием ближайших соседей (рис. I). Эта модель является обобщением модели, предложенной Давыдовым и Супрун^{/1/}. Она учитывает такие основные свойства полипептидной цепи, как регулярность пространственной структуры и специфичность распределения взаимодействий в полипептидной цепи. Эта специфичность заключается в том, что учитываются как взаимодействия пептидных групп, ближайших вдоль спирали, так и взаимодействия пептидных групп, ближайших вдоль водородных связей. Другими словами, модель учитывает взаимодействия ближайших и третьих соседей. По оценкам Невской и Чиргадзе^{/2/} величины этих взаимодействий равны соответственно 12,4 и 7,8 см⁻¹.



Аналитическое решение задачи (I) даже в линейном приближении ($\mathcal{L} = \mathcal{P} = 0$) было бы невозможно, если бы не одно преобразование^{/3/}, справедливое только для одномерных задач. Это преобразование операторов Паули к операторам Ферми ($\rho^{\pm}, \rho \rightarrow a^{\pm}, a$). С помощью такого преобразования модельный гамильтониан (I) может быть преобразован к ферми-представлению

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & \sum_n \sum_{\alpha=1}^3 \Delta a_{n,\alpha}^{\dagger} a_{n,\alpha} + \sum_n \mathcal{M} \{ (1-2N_{n,3})(1-2N_{n,2})(a_{n,1}^{\dagger} a_{n+1,1} + \\
 & + a_{n+1,1}^{\dagger} a_{n,1}) + (1-2N_{n+1,1})(1-2N_{n,3})(a_{n,2}^{\dagger} a_{n+1,2} + a_{n+1,2}^{\dagger} a_{n,2}) + \\
 & + (1-2N_{n+1,2})(1-2N_{n,3})(a_{n,3}^{\dagger} a_{n+1,3} + a_{n+1,3}^{\dagger} a_{n,3}) \} + \\
 & + \sum_n \mathcal{M}' \{ (1-2N_{n,3})(1-2N_{n,2})(a_{n,1}^{\dagger} a_{n+1,1}^{\dagger} - a_{n,1} a_{n+1,1}) + \\
 & + (1-2N_{n+1,1})(1-2N_{n,3})(a_{n,2}^{\dagger} a_{n+1,2}^{\dagger} - a_{n,2} a_{n+1,2}) + \\
 & + (1-2N_{n+1,2})(1-2N_{n+1,1})(a_{n,2}^{\dagger} a_{n+1,3}^{\dagger} - a_{n,2} a_{n+1,3}) \} + \\
 & + \sum_n \sum_{\alpha=1}^3 \mathcal{K} N_{n,\alpha} N_{n+1,\alpha} + \sum_n \mathcal{Q} \{ (a_{n,1}^{\dagger} a_{n,2} + a_{n,2}^{\dagger} a_{n,1}) + \\
 & + (a_{n,2}^{\dagger} a_{n,3} + a_{n,3}^{\dagger} a_{n,2}) + (a_{n,3}^{\dagger} a_{n+1,1} + a_{n+1,1}^{\dagger} a_{n,3}) \} + \\
 & + \sum_n \mathcal{Q}' \{ (a_{n,1}^{\dagger} a_{n,2}^{\dagger} - a_{n,1} a_{n,2}) + (a_{n,2}^{\dagger} a_{n,3}^{\dagger} - a_{n,2} a_{n,3}) + \\
 & + (a_{n,3}^{\dagger} a_{n+1,1}^{\dagger} - a_{n,3} a_{n+1,1}) \} + \sum_n \mathcal{P} \{ N_{n,1} N_{n+1,1} + N_{n,2} N_{n,3} + \\
 & + N_{n,3} N_{n+1,1} \};
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

$$\left| N_{n,\alpha} = a_{n,\alpha}^{\dagger} a_{n,\alpha} \right|.$$

Если ограничиться теперь линейным приближением и отбросить слабые четвертого и более высоких порядков, решение задачи может быть получено в аналитическом виде одним из стандартных квантостатистических методов. В работе^{/4/} мы использовали для этой цели метод двухвременных температурных функций Грина Боголюбова-Тябликова^{/5/}, получили уравнение, определяющее частоты элементарных возбуждений (экситонов) ω ,

$$\begin{vmatrix}
 (\omega - T_K) & -iL_K & -Q & -Q' & -Qe^{-ika} & Q'e^{-ika} \\
 iL_K & (\omega + T_K) & Q' & Q & -Q'e^{-ika} & Qe^{-ika} \\
 -Q & Q' & (\omega - T_K) & -iL_K & -Q & -Q' \\
 -Q' & Q & iL_K & (\omega + T_K) & Q' & Q \\
 -Qe^{ika} & -Q'e^{ika} & -Q & Q' & (\omega - T_K) & -iL_K \\
 Q'e^{ika} & Qe^{ika} & -Q' & Q & iL_K & (\omega + T_K)
 \end{vmatrix} = 0, \tag{3}$$

и нашли решения этого уравнения для частных случаев:

- а) $Q = Q' = 0$ (пренебрежение водородными связями);
- б) $Q' = M' = 0$ (приближение Гайтлера-Лондона); в) $K = 0$. (Здесь $T_K = \Delta + 2M \cos ka$, $L_K = 2M' \sin ka$, k - волновой вектор, a - постоянная решетки). В работе^{/4/} дан подробный анализ этих решений и обсуждается соответствие полученных решений имеющимся экспериментальным данным по спектрам биомолекул. Мы не будем останавливаться здесь на этих результатах. Отметим только, что задачи, связанные с исследованием спектров биомолекул на модельных системах, представляют самостоятельный интерес, по-

сколькx позволяют получать дополнительную информацию о структурных свойствах и характере межмолекулярных взаимодействий, что, в свою очередь, ведет к более глубокому пониманию природы функциональной активности биомолекул.

В общем случае, отталкиваясь от (2), приходим к нелинейной задаче, детальный анализ которой довольно сложен. Мы ограничим наше исследование континуальным приближением ($\kappa \rightarrow 0$) и рассмотрим в рамках этого приближения задачу о движении возбуждений вдоль полипептидной цепи.

2. Чтобы получить уравнения движения, обобщим предложенную нами ранее в работе /6/ схему получения подобных уравнений на случай одномерной решетки с тремя "молекулами" в ячейке. В качестве модельной (пробной) волновой функции состояния системы Ψ выберем функцию вида

$$\Psi = \frac{1}{\mathcal{N}} \left\{ 1 + \sum_n \sum_{\beta=1}^3 [\alpha_{n,\beta}(t) a_{n,\beta}^+ - \alpha_{n,\beta}^*(t) a_{n,\beta}] \right\} |0\rangle, \quad (4)$$

$$a_{n,\beta} |0\rangle = 0; \quad (n=1,2,\dots,N; \beta=1,2,3); \quad |\lambda|^2 = 1 + \sum_n \sum_{\beta=1}^3 |\alpha_{n,\beta}(t)|^2.$$

Спроектируем квантовые уравнения движения для операторов $a_{m,\beta}$ ($\beta = 1,2,3$) справа и слева на волновую функцию

$$\langle \Psi | \quad i \frac{da_{m,\beta}}{dt} = [a_{m,\beta}; \mathcal{H}] | \Psi \rangle; \quad \beta=1,2,3. \quad (5)$$

Выполним далее простейшую процедуру расщепления тройных слагаемых и слагаемых более высокого порядка так, как это было сделано в /6/. В результате получим систему трех уравнений движе-

ния для амплитуд вероятностей $\varphi_{m,\beta}(t) = \frac{da_{m,\beta}(t)}{|\lambda(t)|^2} = \langle \Psi | a_{m,\beta} | \Psi \rangle$,
 $m=1,2,\dots,N; \beta=1,2,3.$

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} \varphi_{m,1} = & \Delta \varphi_{m,1} + \mathcal{M} \left\{ (1-2\mathcal{N}_{m,3})(1-2\mathcal{N}_{m,2})\varphi_{m+1,1} + \right. \\ & + (1-2\mathcal{N}_{m-1,3})(1-2\mathcal{N}_{m-1,2})\varphi_{m-1,1} + (-2)(1-2\mathcal{N}_{m-1,3})(\varphi_{m-1,2}^* \varphi_{m,2}^* + \\ & + \varphi_{m,2}^* \varphi_{m-1,2})\varphi_{m,1} + (-2)(1-2\mathcal{N}_{m,2})(\varphi_{m-1,3}^* \varphi_{m,3}^* + \varphi_{m,3}^* \varphi_{m-1,3})\varphi_{m,1} \left. \right\} + \\ & + \mathcal{M}' \left\{ (1-2\mathcal{N}_{m,3})(1-2\mathcal{N}_{m,2})\varphi_{m+1,1}^* - (1-2\mathcal{N}_{m-1,3})(1-2\mathcal{N}_{m-1,2})\varphi_{m-1,1}^* + \right. \\ & + (-2)(1-2\mathcal{N}_{m-1,3})(\varphi_{m-1,2}^* \varphi_{m,2}^* - \varphi_{m-1,2} \varphi_{m,2})\varphi_{m,1}^* + \\ & + (-2)(1-2\mathcal{N}_{m,2})(\varphi_{m-1,3}^* \varphi_{m,3}^* - \varphi_{m-1,3} \varphi_{m,3})\varphi_{m,1}^* \left. \right\} + \\ & + \mathcal{L} (\mathcal{N}_{m+1,1} + \mathcal{N}_{m-1,1})\varphi_{m,1} + \mathcal{Q} (\varphi_{m,2} + \varphi_{m-1,3}) + \mathcal{Q}' (\varphi_{m,2}^* - \varphi_{m-1,3}^*) + \\ & + \mathcal{P} (\mathcal{N}_{m,2} + \mathcal{N}_{m-1,3})\varphi_{m,1}; \end{aligned} \quad (6)$$

$$i \frac{d}{dt} \varphi_{m,2} = \Delta \varphi_{m,2} + \mathcal{M} \left\{ (1-2\mathcal{N}_{m+1,1})(1-2\mathcal{N}_{m,3})\varphi_{m+1,2} + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + (1-2\mathcal{N}_{m,2})(1-2\mathcal{N}_{m-1,3})\varphi_{m-1,2} + (-2)(1-2\mathcal{N}_{m,3})(\varphi_{m,1}\varphi_{m+1,1}^* + \\
& + \varphi_{m+1,1}^*\varphi_{m,1})\varphi_{m,2} + (-2)(1-2\mathcal{N}_{m,3})(\varphi_{m-1,3}\varphi_{m,3} + \varphi_{m,3}\varphi_{m-1,3})\varphi_{m,2} \} + \\
& + \mathcal{M}' \{ (1-2\mathcal{N}_{m+1,1})(1-2\mathcal{N}_{m,3})\varphi_{m+1,2}^* - (1-2\mathcal{N}_{m,1})(1-2\mathcal{N}_{m-1,3})\varphi_{m-1,2}^* + \\
& + (-2)(1-2\mathcal{N}_{m,3})(\varphi_{m,1}\varphi_{m+1,1}^* - \varphi_{m+1,1}\varphi_{m,1})\varphi_{m,2} + \\
& + (-2)(1-2\mathcal{N}_{m,1})(\varphi_{m-1,3}\varphi_{m,3}^* - \varphi_{m,3}\varphi_{m-1,3})\varphi_{m,2} \} + \\
& + \mathcal{L}(\mathcal{N}_{m+1,2} + \mathcal{N}_{m-1,2})\varphi_{m,2} + \mathcal{Q}(\varphi_{m,1} + \varphi_{m,3}) + \mathcal{Q}'(\varphi_{m,3}^* - \varphi_{m-1,1}^*) + \\
& + \mathcal{P}(\mathcal{N}_{m,1} + \mathcal{N}_{m,3})\varphi_{m,2} ;
\end{aligned} \tag{6}$$

$$\begin{aligned}
i \frac{d}{dt} \varphi_{m,3} & = \Delta \varphi_{m,3} + \mathcal{M} \{ (1-2\mathcal{N}_{m+1,2})(1-2\mathcal{N}_{m+1,1})\varphi_{m+1,3}^* + \\
& + (1-2\mathcal{N}_{m,2})(1-2\mathcal{N}_{m,1})\varphi_{m-1,3} + (-2)(1-2\mathcal{N}_{m,3})(\varphi_{m,1}\varphi_{m+1,1}^* + \\
& + \varphi_{m+1,1}^*\varphi_{m,1})\varphi_{m,3} + (-2)(1-2\mathcal{N}_{m+1,1})(\varphi_{m,2}\varphi_{m+1,2}^* + \varphi_{m+1,2}^*\varphi_{m,2})\varphi_{m,3} \} + \\
& + \mathcal{M}' \{ (1-2\mathcal{N}_{m+1,2})(1-2\mathcal{N}_{m+1,1})\varphi_{m+1,3}^* - (1-2\mathcal{N}_{m,2})(1-2\mathcal{N}_{m,1})\varphi_{m-1,3}^* + \\
& + (-2)(1-2\mathcal{N}_{m,2})(\varphi_{m,1}\varphi_{m+1,1}^* - \varphi_{m+1,1}\varphi_{m,1})\varphi_{m,3} +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (-2)(1-2\mathcal{N}_{m,2})(\varphi_{m-1,2}\varphi_{m,2}^* - \varphi_{m,2}\varphi_{m-1,2})\varphi_{m,3} \} + \\
& + \mathcal{L}(\mathcal{N}_{m+1,3} + \mathcal{N}_{m-1,3})\varphi_{m,3} + \mathcal{Q}(\varphi_{m,2} + \varphi_{m+1,2}) + \mathcal{Q}'(\varphi_{m+1,1}^* - \varphi_{m,2}^*) + \\
& + \mathcal{P}(\mathcal{N}_{m,2} + \mathcal{N}_{m+1,1})\varphi_{m,3} ;
\end{aligned}$$

где $\mathcal{N}_{m,\alpha} = \varphi_{m,\alpha}^* \varphi_{m,\alpha}$ ($\alpha=1,2,3$). Переход от дискретной задачи (6) к непрерывному случаю ($\kappa \rightarrow 0$) выполним по стандартной схеме, предположив, как обычно, что интересующие нас решения изменяются достаточно плавно, т.е. период их изменения много больше постоянной решетки a . Схематически такая процедура, скажем для функций, входящих в первое уравнение системы (6), может быть представлена следующим образом:

$m \rightarrow x$ (полагаем, что постоянная решетки $a=1$);

$$\varphi_{m,1}(t) \rightarrow \varphi_1(x,t) \equiv \alpha(x,t);$$

$$\varphi_{m,2}(t) \rightarrow \varphi_2(x + \frac{a}{3}, t) = \beta(x + \frac{1}{3}, t) = \beta(x,t) + \beta_x(x,t) \cdot \frac{1}{3} + \beta_{xx}(x,t) \cdot \frac{1}{18} + \dots; \tag{7}$$

$$\varphi_{m-1,3}(t) \rightarrow \varphi_3(x - \frac{a}{3}, t) = \gamma(x - \frac{1}{3}, t) = \gamma(x,t) - \gamma_x(x,t) \cdot \frac{1}{3} + \gamma_{xx}(x,t) \cdot \frac{1}{18} - \dots;$$

$$\varphi_{m\pm 1,1}(t) \rightarrow \varphi_{\pm 1}(x \pm a, t) \equiv \alpha(x \pm 1, t) = \alpha(x,t) \pm \alpha_x(x,t) + \alpha_{xx}(x,t) \cdot \frac{1}{2} \pm \dots$$

и т.д.

При выполнении процедуры предельного перехода необходимо учитывать следующий порядок малости слагаемых, возникающих в уравнениях движения,

$$d; \beta; r \sim \delta;$$

$$d_x; \beta_x; r_x \sim \delta^2;$$

$$d_{xx}; \beta_{xx}; r_{xx} \sim \delta^3 \text{ и т.д.}$$

Здесь δ — некоторый обобщенный малый параметр. Мы учтем слагаемые до третьего порядка включительно.

После выполнения процедуры предельного перехода получаем следующую систему нелинейных уравнений:

$$\begin{aligned} i d_t &= (\Delta + 2M)d + M d_{xx} + 2Z |d|^2 d + (P - 8M)(|r|^2 + |\beta|^2)d + \\ &+ Q \left\{ (\beta + r) + \frac{1}{3} (\beta_x - r_x) + \frac{1}{18} (\beta_{xx} + r_{xx}) \right\}; \\ i d_t &= (\Delta + 2M)d + M d_{xx} + 2M d_x^* + 2Z |d|^2 d + (P - 8M)(|r|^2 + |\beta|^2)d - \\ &- 2M' (\beta_x^2 + r_x^2 - \beta^2 - r^2) d + Q \left\{ (\beta + r) + \frac{1}{3} (\beta_x - r_x) + \frac{1}{18} (\beta_{xx} + r_{xx}) \right\} + \\ &+ Q' \left\{ (\beta^* - r^*) + \frac{1}{3} (\beta_x^* + r_x^*) + \frac{1}{18} (\beta_{xx}^* - r_{xx}^*) \right\}; \\ i \beta_t &= (\Delta + 2M)\beta + M \beta_{xx} + 2M' \beta_x^* + 2Z |\beta|^2 \beta + (P - 8M)(|d|^2 + |r|^2)\beta - \\ &- 2M' (d_x^2 + r_x^2 - d^2 - r^2)\beta + Q \left\{ (r + d) + \frac{1}{3} (r_x - d_x) + \frac{1}{18} (r_{xx} - d_{xx}) \right\} + \\ &+ Q' \left\{ (r^* - d^*) + \frac{1}{3} (r_x^* + d_x^*) + \frac{1}{18} (r_{xx}^* - d_{xx}^*) \right\}; \\ i r_t &= (\Delta + 2M)r + M r_{xx} + 2M' r_x^* + 2Z |r|^2 r + (P - 8M)(|d|^2 + |\beta|^2)r + \\ &+ Q \left\{ (d + \beta) + \frac{1}{3} (d_x - \beta_x) + \frac{1}{18} (d_{xx} + \beta_{xx}) \right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

Уравнения системы (8) представляют собой модификации нелинейного уравнения Шредингера и довольно сложны. Мы ограничим наше исследование более простым случаем: так называемым приближением Гайтлера-Лондона ($Q' = M' = 0$). В этом приближении уравнения движения (8) существенно упрощаются:

$$\begin{aligned} i d_t &= (\Delta + 2M)d + M d_{xx} + 2Z |d|^2 d + (P - 8M)(|r|^2 + |\beta|^2)d + \\ &+ Q \left\{ (\beta + r) + \frac{1}{3} (\beta_x - r_x) + \frac{1}{18} (\beta_{xx} + r_{xx}) \right\}; \\ i \beta_t &= (\Delta + 2M)\beta + M \beta_{xx} + 2Z |\beta|^2 \beta + (P - 8M)(|r|^2 + |d|^2)\beta + \\ &+ Q \left\{ (r + d) + \frac{1}{3} (r_x - d_x) + \frac{1}{18} (r_{xx} + d_{xx}) \right\}; \\ i r_t &= (\Delta + 2M)r + M r_{xx} + 2Z |r|^2 r + (P - 8M)(|d|^2 + |\beta|^2)r + \\ &+ Q \left\{ (d + \beta) + \frac{1}{3} (d_x - \beta_x) + \frac{1}{18} (d_{xx} + \beta_{xx}) \right\}. \end{aligned} \quad (9)$$

Теперь уравнения движения (9) представляют собой зацепляющиеся между собой уравнения типа нелинейного уравнения Шредингера. Это обстоятельство существенно использовалось нами при определении вида искомого частного решения. Важно отметить, однако, что в отличие от случая отдельного нелинейного уравнения Шредингера § 3 при поиске решений системы уравнений необходимо учитывать особенности соотношения фаз.

3. Мы остановимся только на наиболее интересных частных решениях системы уравнений (9) — решениях солитоноподобного вида. Начнем с наиболее простого случая, когда соседние "молекулы" решетки изменяют свое состояние в фазе. В этом случае частное решение системы (9) ищем в виде

$$\alpha_1(x,t) = \beta_1(x,t) = \rho_1(x,t) = \frac{A_1}{\operatorname{ch} v_1(x - v_1 t)} \exp i(kx - \omega_1 t). \quad (10)$$

Подставляя (10) в (9), находим величины v_1 , v_1 и ω_1 :

$$v_1 = -2 \left(M + \frac{Q}{g} \right) k; \quad v_1^2 = \frac{L + P - 8M}{M + \frac{Q}{g}} A_1^2;$$

$$\omega_1 = \Delta + 2M \left(1 - \frac{k^2}{2} \right) + 2Q \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{k}{3} \right)^2 \right\} + (L + P - 8M) A_1^2.$$

Здесь v_1 — скорость перемещения солитона, v_1 характеризует размер солитона (или, точнее, размер области, охваченной возбуждением), ω_1 — частота солитона. Постоянная A_1 определяется условием нормировки.

Отметим, что полученное выражение для ω_1 хорошо согласуется с соответствующим решением линейной задачи^{4/}

$$\omega_1^{\text{лин.}} = \Delta + 2M \cos ka + 2Q \cos \frac{ka}{3}.$$

Действительно, при $a=1$ и $k \rightarrow 0$

$$\omega_1^{\text{лин.}} = \Delta + 2M \left(1 - \frac{k^2}{2} \right) + 2Q \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{k}{3} \right)^2 \right\}.$$

Дополнительное слагаемое $(L + P - 8M) A_1^2$ дает поправку к энергии возбуждения вследствие учета нелинейности.

Рассмотрим два других случая, когда "молекулы" соседних узлов решетки изменяют свое состояние со сдвигом фаз $2\pi/3$ и $4\pi/3$ соответственно. Частные решения системы (9) ищем в виде

$$\begin{aligned} \alpha_j(x,t) &= \frac{A_j}{\operatorname{ch} v_j(x - v_j t)} \exp i(kx - \omega_j t); \\ \beta_j(x,t) &= \frac{A_j e^{i\sigma_j}}{\operatorname{ch} v_j(x - v_j t)} \exp i(kx - \omega_j t); \\ \rho_j(x,t) &= \frac{A_j e^{-i\sigma_j}}{\operatorname{ch} v_j(x - v_j t)} \exp i(kx - \omega_j t). \end{aligned} \quad (11)$$

Для краткости мы объединили в (11) второй ($j=2$) и третий ($j=3$) случаи. Сдвиг фазы σ_j равен $2\pi/3$ при $j=2$ и $4\pi/3$ при $j=3$. Подставляя (11) в (9), находим величины v_j , v_j и ω_j ($j=2,3$):

$$v_{2,3} = -2 \left(M + \frac{Q}{g} \cos \frac{2\pi}{3} \right) k \mp \frac{2}{3} Q \sin \frac{2\pi}{3};$$

$$v_{2,3}^2 = \frac{L + P - 8M}{M + \frac{Q}{g} \cos \frac{2\pi}{3}} A_{2,3}^2;$$

$$\begin{aligned} \omega_{2,3} &= \Delta + 2M \left(1 - \frac{k^2}{2} \right) + 2Q \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{k}{3} \right)^2 \right\} \cos \frac{2\pi}{3} \mp \frac{2}{3} Q \sin \frac{2\pi}{3} + \\ &+ (L + P - 8M) A_{2,3}^2. \end{aligned}$$

Постоянные A_j ($j=2,3$) определяются нормировкой.

Нетрудно убедиться, что и в этих случаях решения для частот

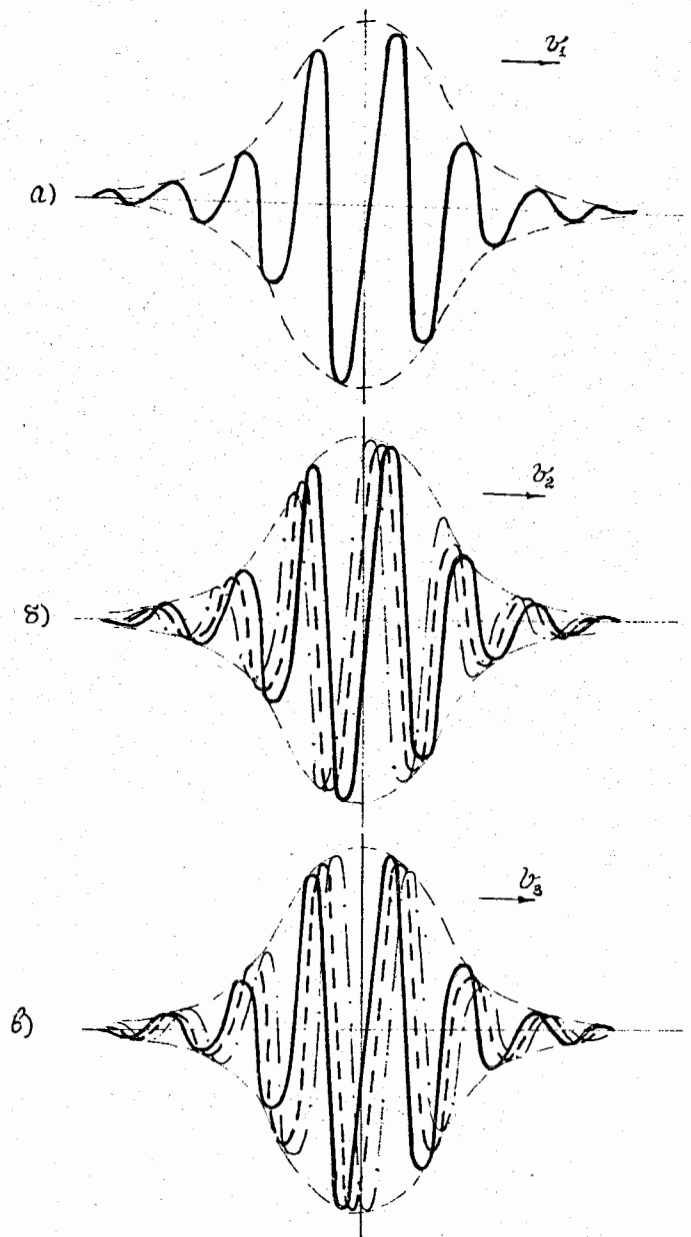
$\omega_{2,3}$ хорошо согласуются (при $q = 1$, $\kappa \rightarrow 0$) с соответствующими решениями линейной задачи^{/4/}:

$$\omega_{2,3} = \Delta + 2M \cos ka + 2Q \cos \frac{ka \pm 2\pi}{3}.$$

На рис.2 дано графическое изображение полученных решений. Они представляют собой модулированные волны, которые в первом случае совпадают по фазе, а в двух других - сдвинуты по фазе на $2\pi/3$ и $4\pi/3$ соответственно.

В заключение отметим, что задача о динамике возбуждений в биомолекулах в предельном случае $\kappa \rightarrow 0$ и в приближении Гайтлера-Лондона изучалась иным методом в работах^{/1,7/}. Полученная там система трех нелинейных уравнений движения существенно отличается (в линейной части) от уравнений (9). В результате авторы работ^{/1,7/} нашли только совпадающие по фазе солитоноподобные решения и классифицировали их в зависимости от характера соотношений между амплитудами (найденными из условий нормировки) как симметричные и антисимметричные солитоны.

Рис.2. Графическое изображение трех типов решений системы нелинейных уравнений (9): а) модулированные волны совпадают по фазе; б), в) - модулированные волны сдвинуты по фазе на $2\pi/3$ и $4\pi/3$ соответственно.



Л и т е р а т у р а

1. А.С.Давыдов, А.Д.Супрун. УФЖ, 19, 44, 1974.
2. Н.А.Невская, Ю.Н. Чиргадзе. Biopolymers, 15, 637, 1976.
3. D.V.Chesnut, A.Suna. J.Chem.Phys., 39, 146, 1963.
4. В.К.Федянин, Л.В.Якушевич. J.Theor.Biol., 1980 (в печати).
5. Н.Н.Боголюбов, С.В.Тябликов. ДАН СССР, 126, 53, 1959.
6. В.К.Федянин, Л.В.Якушевич. Phys.Letters, 61A, 256, 1977.
7. А.С.Давыдов, А.А.Еремко, А.И.Сергеенко. Препринт ИФ-78-2Р, Киев, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 февраля 1981 года.