объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-82-582

В.К.Федянин

РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ НА СОЛИТОНАХ В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ СИСТЕМАХ

Направлено в Оргкомитет VI Международной
конференции по рассеянию нейтронов
конденсированными средами
/Токио, сентябрь 1982 г./

1982

1. В последние годы частицеподобные возбуждения, описываемые солитонными решениями нелинейных дифференциальных уравнений, стали широко использоваться в различных физических приложениях. Локализованные в пространственно-временной области $(x,t) \sim \Delta(v)$, характеризуемые массой и энергией $M(v)$, $E(v)$ / v - скорость солитона/, $\Lambda(v)$, $M(v)$, $E(v)$ определяются параметрами гамильтониана. Эти возбуждения могут определить весьма нетривиальное поведение равновесных и, в особенности, динамических характеристик квазиодномерных систем в некоторой области температур.

Проанализируем в этой связи поведение дважды дифференциального сечения $\sigma_s(q,\omega)$, определяемого в газовом приближении обычным образом

$$\sigma_s(q,\omega) = b^2 \frac{k'}{k} \bar{N}_s S_1(q,\omega), \quad q = k'-k, \quad \omega = E'-E, \qquad /1/$$

b - длина рассеяния, $\bar{N}_s$ - среднее число солитонов, $S_1(q,\omega)$ - динамический структурный фактор отдельного рассеивателя

$$S_1(q,\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint dx\, dt\, S_1(x,t)\, e^{i(qx-\omega t)}. \qquad /2/$$

Заметим, что $S_1(x,t)$ строится на солитонных решениях

$$\Phi(x,t/x_0,p,\theta_0) \equiv \Phi(x,t), \quad \Phi(0,0/x_0,p,\theta_0),$$

(x_0, p_0, θ_0) - начальное положение, импульс и фаза, по которым необходимо провести усреднение, выражается $S_1(xt)$ следующим образом /1/:

$$S_1(x,t) = \frac{1}{Z_1 h} \int_{-L}^{L} dx_0 \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_0}{2\pi} \int dp\, e^{-\beta E(p)} \Phi(x,t)\, \Phi(0,0), \qquad /3/$$

$$Z_1 = \frac{1}{h} \int_{-L}^{L} dx_0 \int dp\, e^{-\beta E(p)} = \frac{2L}{h} \int dp\, e^{-\beta E(p)}.$$

Формула /3/ обобщает идею работы /2/. Для простоты будем рассматривать случай, когда $\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\theta_0\,[\ldots] = 1$. Усреднение по θ_0 существенно для бионов и приводит к интересным модификациям поведения $S_1(q,\omega)$ /3/, но полностью укладывается в развитую ниже общую схему. Подставляя /3/ в /2/, учитывая характерную зависимость солитонных решений от $(\frac{x-vt+x_0}{\Delta(v)})$ после очевидных замен переменных

$(x+x_0)=\xi\Delta(v)$, $vt=\tau(\Delta(v))$, а затем $R=\frac{\xi+\tau}{2}$, $\rho=\xi-\tau$, несложно выполнить интегрирования по R и ρ, а затем и по x_0, p /1/. Это дает окончательно

$$S_1(q,\omega)=\frac{p'(v_0)\,\Delta^2(v_0)}{2\pi q Z_1 h} f(q\Delta(v_0))f(-q\Delta(v_0))e^{-\beta E(v_0)}, \qquad /4/$$

$$f(\lambda)=\int\Phi(\rho)e^{i\lambda\rho}\,d\rho, \qquad v_0=\omega/q.$$

Формулы /4/ и /1/, дополненные рецептом вычисления $\bar{N}_s$ /см. ниже/, решают задачу нахождения $\sigma_s(q,\omega)$. Подчеркнем, что мы обошли громоздкую задачу вычисления $S_1(x,t)$ – путь, по которому пошли в работах /2,4–7/. При этом в процессе вычислений приходилось постулировать наличие некоторых малых параметров ($v\ll c_0$, $p\ll p_0$, $\beta E_s\gg 1$ и т.п./.

2. Многие совершенно различные по своей физической специфике модельные системы теории конденсированного состояния описываются гамильтонианом вида

$$H=Aa_0\sum_i\left(\frac{1}{2}\dot{\Phi}_i^2+\frac{c_0^2}{2a_0^2}[\Phi_{i+1}-\Phi_i]^2+\omega_0^2V(\Phi_i)\right). \qquad /5/$$

В /5/ $\Phi_i(t)$ – реальное однокомпонентное безразмерное поле в узле "i", c_0, ω_0 – характерные параметры размерности скорости и частоты, a_0 – постоянная решетки, A – константа, задающая энергетический масштаб размерности /энергия·/длина/$^{-1}$ · /время/$^{+2}$ /= = /масса · длина/. В /5/ налицо комбинация "кинетического" и "градиентного" слагаемых с потенциалом $V(\Phi_i)$ локального типа. Перечень наиболее употребительных $V(\Phi_i)$ дан в /8/. В континуальном приближении ($d=c_0/\omega_0\gg a_0$) имеем дифференциальное уравнение для $\Phi(x,t)$

$$\ddot{\Phi}-c_0^2\Phi_{xx}=-\omega_0^2\frac{dV}{d\Phi}. \qquad /6/$$

Вид уравнения /6/ диктует переход к переменной $(x-vt)$, что позволяет найти частное решение в виде эллиптического интеграла, зависящее от некоторой константы. С его помощью можно построить величины типа "импульса" и "массы"

$$p=M_s v\gamma(v),\quad E(v)=E_s\gamma(v)=M_s c_0^2\gamma(v), \qquad /7/$$

$$M_s=2Ad^{-2}\int_{-\infty}^{\infty}V[\Phi(x,t)]\,dx,\quad \gamma=\left(1-\frac{v^2}{c_0^2}\right)^{-1/2}.$$

Будем считать, что эти решения и описывают частицеподобные возбуждения /кинки, антикинки и бионы/. Проиллюстрируем здесь использование /4/ на примере кинковых решений SG-уравнения, для которого $V(\Phi)=1-\cos\Phi$. В этом случае

$$M_s=8A\omega_0c_0^{-1},\quad p'(v)=M_s\gamma^3(v),\quad E_s=8A\omega_0c_0,$$

$$\cos\Phi(x,t)=1-2\,\mathrm{sech}^2\left[\frac{x-vt+x_0}{\Delta(v)}\right],\quad \Delta(v)=\frac{d}{\gamma(v)}, \qquad /8/$$

$$Z_1=\frac{L}{h}\int dp\,e^{-\beta E(p)}=\frac{64LA\omega_0}{h}K_1(\beta E_s),$$

где $K_1(z)$ – функция Макдональда, $z=\beta E_s$. Обычно /4–7/ физическую ситуацию необходимо описывать в терминах фурье-образа от произведений

$$\cos\Phi(x,t)\cos\Phi(0,0),\qquad \sin\Phi(x,t)\sin\Phi(0,0),$$

они определяют так называемую поперечную и продольную $S_1^{\perp}$, $S_1^{\parallel}$ части формфакторов. Фигурирующая в /4/ $\Phi(\rho)$, следовательно, есть либо $2\,\mathrm{sech}^2\rho$, либо $2\,\mathrm{sh}^{-1}\rho\,\mathrm{sech}^2\rho$, соответственно /мы выписываем лишь вклад солитонной моды/. Для $f(\lambda)$ из /5/ имеем

$$f_{\perp}(\lambda)=2\int\mathrm{sech}^2\rho\,e^{i\lambda\rho}\,d\rho=\frac{4\lambda\pi}{\mathrm{sh}\frac{\lambda\pi}{2}},$$

$$f_{\parallel}(\lambda)=2\int\frac{e^{i\lambda\rho}\,d\sigma}{\mathrm{sech}^2\rho\ \mathrm{csch}\rho}=\frac{4i\lambda\pi}{\mathrm{ch}\frac{\lambda\pi}{2}}, \qquad /9/$$

$$f_{\perp}(q\Delta(v_0))=\frac{8x}{\mathrm{sh}\,x},\quad f_{\parallel}(q\Delta(v_0))=\frac{8ix}{\mathrm{ch}\,x},\quad x=\frac{\pi qd}{2\gamma(v_0)}.$$

С учетом /8/ и /9/ получаем для $S_1^{\nu}(q,\omega)$, $\nu=\perp,\parallel$ выражения

$$S_1^{\perp}=\frac{p}{2L}\mathrm{sh}^{-2}x,\quad S_1^{\parallel}=\frac{p}{2L}\mathrm{ch}^{-2}x,\quad p=\frac{8c_0^2x^{-1}e^{-z}}{\omega_0^3K_1(z)}. \qquad /10/$$

В том случае /он достаточно обычен/, когда в $\sigma_s(q,\omega)$ дают вклад и $S_1^{\perp}$, и $S_1^{\parallel}$, мы имеем следующую общую формулу для $\sigma_s(q,\omega)$:

$$\sigma_s(q,\omega)=b^2\frac{k'}{k}p\bar{n}[\mathrm{sh}^{-2}x+\mathrm{ch}^{-2}x]. \qquad /11/$$

Здесь $\bar{n}-\bar{N}_s/2L$ - равновесная плотность солитонов /по /3/ мы брали длину $(2L)$/. Наряду с обширным кругом задач, сводящихся к гамильтониану /7/, и при $d \gg a_0$ - к уравнению /8/ с $V(\Phi)=1-\cos\Phi$, упомянем и задачу о ДНК[/9/]: мы приходим к уравнению SG с $A=Ja_0^{-1}$, $c_0^2=k\,a_1^2J^{-1}$, $\omega_1^2=V_0J^{-1}$, где J - приведенный момент инерции основания / $J\simeq/210-320/\cdot10^{-38}$ г.см^2/, k - крутильная жесткость участков полипептидной спирали / $k\simeq/0,2\div2/\cdot10^{-11}$ эрг, $V_0\simeq10^{-15}$ эрг. Соотношение $d\gg a_0(\sqrt{k}\gg\sqrt{V_0})$ для ДНК прекрасно выполняется.

3. Если уравнение /6/ описывает, так сказать, "релятивистские" модели в теории конденсированного состояния, то в весьма широком плане систем шредингеровские амплитуды состояния подчиняются уравнению

$$i\hbar\dot{\phi}=a\phi-b\phi_{xx}-c|\phi|^2\phi. \qquad /12/$$

К таким моделям относятся, например, модель полярона Хольстейна[/10/], экситоны большой плотности[/11/], ферромагнетик Гейзенберга при учете спин-фононного взаимодействия[/12/], молекулярные кристаллы с нормальным взаимодействием при учете экситон-фононного взаимодействия с малой плотностью экситонов[/11/], и многие другие. Параметры a , b , c выражаются через параметры гамильтониана и при $b>0$, $c>0$ /альтернативно $b<0$, $c<0$ / односолитонное нормированное решение имеет вид

$$\phi(x,t)=\left(\frac{a_0}{2\Delta}\right)^{1/2}\frac{\exp(ikx-i\omega t+i\theta_0)}{\mathrm{ch}\left(\frac{x-vt+x_0}{\Delta}\right)} \qquad /13/$$

$$\hbar\omega=a+\frac{\hbar^2v^2}{4b}-\frac{a_0c}{4\Delta},\qquad \Delta=4b/a_0c,$$

где x_0 , θ_0 - начальные амплитуда и фаза, a_0 - постоянная решетки, v - скорость огибающей. Рассчитанные с помощью /13/ энергия и импульс солитона всегда даются формулами вида

$$E_s=E_0+\frac{m_sv^2}{2},\quad p=m_sv,\quad m_s=\frac{\hbar^2}{2|b|}. \qquad /14/$$

Решения при $b>0$, $c<0$ /альтернативно $b<0$, $c>0$ / отвечают "кинкам", их также можно трактовать как волновые функции соответствующих возбуждений, но мы ограничимся случаем /13/.

Как правило, нас интересуют характеристики частиц, определяемые усреднением величин типа $\phi^*(x,t)\,\phi(x,t)\,\phi^*(0)\,\phi(0)$ [/12/]. Таким образом

$$\Phi(\rho)=\frac{a_0}{2\Delta}\mathrm{ch}^{-2}\rho\ ,$$

$$f(\lambda)=\frac{a_0}{2\Delta}\int\frac{e^{i\lambda\rho}}{\mathrm{ch}^2\rho}d\rho=\frac{\lambda\pi a_0}{\Delta\,\mathrm{sh}\frac{\lambda\pi}{2}},\quad f(q\Delta)=f(-q\Delta)=\frac{2a_0x}{\Delta\,\mathrm{sh}\,x}, \qquad /15/$$

$$Z_1=\frac{2L}{h}e^{-\beta E_0}(2\pi m_s\theta)^{1/2},\qquad x=\frac{\pi q\Delta}{2}.$$

Из /15/ и /4/ имеем для $S(q,\omega)$

$$S(q,\omega)=\bar{n}\,\frac{a_0^2}{q}\left(\frac{2m_s}{\pi^3\theta}\right)^{1/2}\left(\frac{x}{\mathrm{sh}\,x}\right)^2e^{-\frac{m_s}{2\theta}\left(\frac{\omega}{q}\right)^2}, \qquad /16/$$

что является, по-существу, нерелятивистским аналогом $S^{\perp}(q,\omega)$ (12).

Заметим, что для физически содержательных моделей Хаббарда[/13/] и модели α-спирали мы приходим к системе уравнений типа /14/. Соответствующие односолитонные решения этих систем можно рассматривать как шредингеровские амплитуды частицеподобных возбуждений смеси газов. Для α-спирали мы имеем трехкомпонентную смесь, каждая компонента которой описывается амплитудой типа /13/. В модели Хаббарда возникает весьма интересная ситуация: налицо смесь возбуждений "с притяжением" и "отталкиванием". И для этих моделей можно было бы развить методику расчета $S(q,\omega)$, подобную вышеочерченной.

Предложенный подход позволяет рассчитать $S(q,\omega)$ для одномерного анизотропного ферромагнетика типа "Легкая ось", описываемого гамильтонианом

$$\hbar\vec{S}_t=J(\vec{S}\times\vec{S}_{\xi\xi})+A(\vec{S}\times\vec{n})(\vec{S}\cdot\vec{n}), \qquad /17/$$

$\vec{n}$ - единичный вектор вдоль оси, $J>0$, $A>0$. Мы не учитываем взаимодействия с колебаниями решетки /хотя это и можно сделать/. В этом смысле частицеподобные возбуждения, описываемые солитонными решениями /17/, являются "чисто магнитными" солитонами. Воспользовавшись явным видом этих решений, полученных в работе[/15/], отметим, кстати, что, как и уравнения SG и S3, /17/ является полностью интегрируемым, - после довольно длинных выкладок[/1/] получаем

$$S(q,\omega)=\bar{n}_s\frac{\sqrt{J}}{A^{3/2}}\frac{p_0a_0^2}{2\pi q}\left(\frac{\mathrm{sh}\frac{2n}{n_0}}{\mathrm{sh}\frac{q\Delta(v_0)}{2}}\right)^2\frac{e^{-a\,\mathrm{Sin}^2\frac{\pi\omega m_n^*}{2p_0q}}}{e^{-a/2}I_0\left(\frac{a}{2}\right)}, \qquad /18/$$

$$a=\frac{8S^2h^2}{a_0^2m_n^*\theta},\quad m_n^*=\frac{m_0^*n_0}{2}\mathrm{sh}\frac{2n}{n_0},\quad m_0^*=\frac{\hbar^2}{2SJa_0^2},$$

$$p_0=\frac{hS}{a_0},\quad n_0=4S\left(\frac{J}{A}\right)^{1/2},\ \Delta(v_0)=\left(\frac{A}{J}\right)^{1/2}\left(1+\mathrm{Sin}^2\frac{\pi\omega m_n^*}{2p_0q}/\mathrm{sh}^2\frac{n}{n_0}\right)\frac{\mathrm{th}\frac{n}{n_0}}{a_0}.$$

$I_0(z)$ - функция Бесселя нулевого порядка, n - число магнонов, связанных в солитонной моде, m_n^* можно трактовать как массу этого связанного состояния. В частном случае $\pi\omega\, m_n^* \ll 2p_0 q$ и $a \gg 1 (n \lesssim n_0)$ приходим к интенсивности квазиупругой компоненты гауссовского типа[7]. Формула /19/ справедлива для любого n.

4. Для использования полученных выше выражений $S(q,\omega)$ при анализе экспериментальных данных по рассеянию нейтронов квазиодномерными системами необходим явный вид $\bar{n}_s = \bar{N}_s/2L$. Нам представляется, что проще всего процедуру вычисления $\bar{n}_s$ /и других равновесных величин/ сформулировать на языке введения эффективного гамильтониана в модели одномерного решеточного газа. Это является, по существу, последовательным развитием идеи работы[16].

Разобьем нашу одномерную систему на N ячеек размером Δ /$L = N\Delta$ - мы здесь будем рассматривать $0 \le x \le L$ /. Каждая ячейка может быть либо занята солитоном, либо пуста. В таком случае оператор $N_s = \sum_f n_f$, где $n_f = 0,1$, "считает" солитоны. Среднее число солитонов и $\bar{n}_s$, фигурирующее выше, дается формулами

$$\bar{N}_s = \langle \Sigma\, n_f \rangle = N\langle n\rangle\,, \quad \bar{n}_s = \frac{\bar{N}_s}{L} = \frac{\langle n\rangle}{\Delta}\,, \qquad /19/$$

где усреднение ведется по некоторому эффективному гамильтониану. В ортодоксальном подходе однокомпонентного идеального решеточного газа[17]

$$\langle n\rangle = \frac{j(T)\, e^{\beta\mu}}{1 + j(T)\, e^{\beta\mu}} \simeq j(T)\,, \qquad /20/$$

где мы используем канонический ансамбль ($\mu = 0$), а $j(T)$ - "неконфигурационная" часть статсуммы, описывающей движение частицы в ячейке Δ:

$$j(T) = \frac{1}{h}\int_0^{\Delta} dx_0 \int e^{-\beta E(p)}dp = \frac{\Delta}{h}\int e^{-\beta E(p)}dp\,. \qquad /21/$$

Отметим, что в этом случае фигурирующее выше отношение $\bar{N}_s/Z_1$ равно $\bar{N}_s/Z_1 = \dfrac{N\langle n\rangle}{L\, j(T)} = \Delta^{-1}$.

Эффективный гамильтониан запишется в виде

$$H_1 = -\beta^{-1}\ln j(T) \sum_f n_f\,. \qquad /22/$$

Если мы хотим учесть результаты, полученные в рамках метода transfer-matrix, то эффективный гамильтониан выглядит следующим образом:

$$H_2 = r\sum_f n_f\,, \quad r = -\theta\ln\left(\frac{b\mu\Delta}{h}\right) + U,$$

$$U = E_s - \theta\sigma - \theta\ln\beta\hbar\omega_0\,, \quad \mu = \frac{2E_s}{c_0}\, e^{\beta E_s} K_1(\beta E_s), \qquad /23/$$

мы выписываем H_2 для моделей типа Sin-Gordan(Φ^4, $\sin\Phi$ и т.п.). "Захват" голдстоуновской моды ($\omega = 0$) и связывание мод с $0 < \omega < \omega_0$, описываемые слагаемым $(-\theta\sigma - \beta\hbar\omega_0)$, а также собственная энергия солитона E_s суммируются слагаемым U, а "кинетическая" энергия - первым слагаемым в r. Она, в духе идей[8], на равных правах входит в H_2 /для SG модели $b = 2$, $\sigma = \ln 2$; $b = 1$, $\sigma = 2\sqrt{3}$ - для модели Φ^4 см[8]/. Приближение[16] получается на базе гамильтониана

$$H_0 = E_s\,\Sigma\, n_f - \theta\ln j(T)\,\bar{N}_s\,, \qquad /24/$$

т.е. лишь "энергия покоя" солитона связывается с вкладом в решеточную часть гамильтониана. Формулы /22/-/24/ позволяют рассчитать все равновесные величины идеального газа солитонов и полностью решают задачу вычисления $S(q,\omega)$.

Заметим в заключение, что при известной смелости можно пойти в этом направлении и дальше[1]. Полагая, что взаимодействуют лишь ближайшие солитоны, можно описать эту систему гамильтониана Изинга:

$$H = E_0 + \nu\sum_f h_f - \frac{\epsilon}{2}\sum_{f,g} n_f n_g\,, \qquad /25/$$

где (f,g) - ближайшие соседи, ϵ - параметр взаимодействия ближайших соседей. С гамильтонианом /25/ могут быть точно вычислены все корреляционные функции $\langle \prod_i n_i \rangle$[18]. Для ϵ, скажем, в системе кинков и антикинков, существуют конкретные выражения. Все это позволит учесть корреляционные эффекты, вероятности "кластеризации" и т.п.[1] в квазиодномерных системах при наличии в них частицеподобных возбуждений солитонного типа.

ЛИТЕРАТУРА

1. Федянин В.К. ОИЯИ, Р17-82-268, Дубна, 1982.
2. Kowasaki K. Progr.Theor.Phys., 1976, 55, p.2029.
3. Маханьков В.Г. ОИЯИ, Р17-82-248, Дубна, 1982.
4. Mikeska A.I. J.Phys., 1978, 55, p.129.
5. Федянин В.К., Юшанхай В.Ю. ОИЯИ, Р17-12896, Дубна, 1979.
6. Федянин В.К., Юшанхай В.Ю. Phys.Lett., 1981, 85A, p.100.
7. Федянин В.К., Юшанхай В.Ю. ФТНТ, 1981, №2, с.176.
8. Currie I.F. et al. Phys.Rev., 1980, B22,2, p.477.
9. Englander S.W. et al. Proc.Nat.Acad.Sci. USA, 1980, 77, p.7222.
10. Федянин В.К., Юшанхай В.Ю. ТМФ, 1978, 35, с.240.
11. Федянин В.К., Якушевич Л.В. ТМФ, 1978, 37, с.371.
12. Федянин В.К., Юшанхай В.Ю. Phys.Lett., 1981, 85A, p.100.

13. Lindner V., Fedyanin V.K. phys.stat.sol.(b), 1978, p.123; 1979, p.95, КФЗ; Федянин В.К. ТМФ, 1981, 46, т.1., с.86.
14. Fedyanin V.K., Yakuschevitch L.V. Journ.Quant.Chem., 1982, 21,6, p.1019.
15. Иванов В.А., Косевич А.М. ЖЭТФ, 1977, 72, с.2000.
16. Krumhansl I.A., Schrieffer I.R. Phys.Rev., 1975, B11, p.3535.
17. Хилл Т. Статистическая механика. ИЛ, М., 1960.
18. Федянин В.К. В сб.: Статистическая механика и квантовая теория поля /под ред. Н.Н.Боголюбова/. Физматгиз, М., 1973.

Рукопись поступила в издательский отдел
2 августа 1982 года.

Федянин В.К. P17-82-582
Рассеяние нейтронов на солитонах в квазиодномерных системах

Получено простое, но достаточно общее выражение для динамического формфактора на "газе" солитонов в квазиодномерных системах. С его помощью рассчитаны формфакторы для SG -уравнения, уравнения S3 и ферромагнетика типа "Легкая ось" для произвольных значений параметров гамильтониана. Эти конкретные формулы можно использовать для обсуждения поведения сечения рассеяния нейтронов на солитонах широким классом квазиодномерных систем /магнетиками, полипептидами, ДНК/.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Fedyanin V.K. P17-82-582
Neutron Scattering on Solitons in the Quasi-One-Dimensional Systems

A simple, rather general expression is obtained for the dynamic form factor on the "gas" of solitons in quasi-one-dimensional systems. With the help of it form factors are calculated for the SG-equation, S3- equation and ferromagnet of the type of "light axis" for arbitrary values of the Hamiltonian parameters. These formulae can be used to consider the behaviour of the cross section of the neutron scattering on solitons in a wide class of quasi-one-dimensional systems (magnets, polypeptide, DNA).

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод Т.Ю.Думбрайс.