сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17-84-356

Д.А.Светогорски, В.К.Федянин

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ РАССМОТРЕНИЕ РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ НА СОЛИТОНАХ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЦЕПОЧКАХ

1984

Давыдовым и сотрудниками [1] была выдвинута гипотеза, согласно которой в α-спиральных полипептидных молекулах возможно распространение особых частицеподобных возбуждений, которые могут распространяться как нерасплывающиеся волновые пакеты. Дальнейшее количественное развитие эти представления получили в [2]. В данной работе рассматривается сечение рассеяния тепловых нейтронов на молекулярных солитонах. Отметим в этой связи, что в одномерном магнетике $CsNiF_3$ солитоны были обнаружены именно при помощи рассеяния нейтронов [3]. Рассеяние нейтронов на солитонах в молекулярных цепочках исследовалось в работе Адамяна и Митлера [4], причем только рассеяние на искаженной солитоном решетке. Здесь мы рассмотрим рассеяние нейтронов на "экситонной" части солитона.

Из методических соображений остановимся коротко на "исторических" аспектах вопроса о солитонах в молекулярных цепочках. Неподвижные солитоны впервые ввел Рашба [5]*, им была рассмотрена сильная фонон-экситонная связь при наличии большого резонансного взаимодействия. В этой ситуации вместо "прилипших" [6,7] /локализованных/ экситонов могут реализоваться связанные состояния экситона и деформации решетки. Рашба получил уравнение /стационарное нелинейное уравнение Шредингера/ для волновой функции связанного экситона и показал, что оно имеет решение:

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{2\Delta}}\,\mathrm{ch}^{-1}\left(\frac{x - x_0}{\Delta}\right), \qquad /1/$$

где Δ - ширина экситонной волновой функции.

Движение связанного экситон-решеточного состояния Рашба не рассматривал, это было сделано Давыдовым и сотрудниками [1]. Уклоняясь от обычной схемы рассмотрения связанных с решеткой состояний [8], они предложили описывать движение связанного экситон-решеточного состояния при помощи временной версии нелинейного уравнения Шредингера. Это уравнение, как известно, имеет солитонные решения:

---

*В оригинальной работе [5], естественно, термин "солитон" не фигурировал.

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\Delta}} \frac{e^{i(kx - \omega t + \theta_0)}}{\mathrm{ch}\left(\frac{x - x_0 - vt}{\Delta}\right)}, \qquad /2/$$

где v и Δ - скорость и ширина солитона соответственно, k и ω - его волновые векторы и частота.

Рассмотрим рассеяние нейтронов на солитонах в кинематическом приближении. Мы считаем, что в процессе рассеяния волновая функция рассеивателя не изменяется. Чтобы получить уравнение для волновой функции нейтрона в этом приближении, предположим, что до взаимодействия волновая функция системы /рассеиватель + нейтрон/ выражается следующим образом:

$$\psi(0) = \psi_n(0)\psi_p(0). \qquad /3/$$

Очевидно, что в силу сделанного выше предположения о волновой функции рассеивателя, волновая функция системы в момент времени t имеет вид

$$\psi(t) = \psi_n[t, \psi_p(t)]\psi_p(t). \qquad /4/$$

Уравнение, которому должна удовлетворять функция $\psi_n(t)$, можно получить, пользуясь вариационным принципом. Оно имеет следующий вид:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n(t, x)}{\partial t} = \hat{H}_n \psi(t) + \int \psi_p^*(t, q) V(q, x) \psi_p(t, q)\, dq \psi_n(t). \qquad /5/$$

Это уравнение типа Хартри-Фока, но оно имеет другой смысл, т.к. функция $\psi_p(t)$ задана для каждого момента времени, т.е. /5/ - одночастичное уравнение Шредингера с эффективным потенциалом

$$\tilde{V}(x, t) = \int \psi_p^*(t, q) V(q, x) \psi_p(t, q)\, dq. \qquad /6/$$

Из /6/ следует, что "жесткие" стационарные состояния рассеивателя

$$\psi_p(t, q) = e^{-iEt/\hbar} \psi_E(q) \qquad /7/$$

не будут давать вклад в неупругое рассеяние нейтронов. Наоборот, нестационарные состояния будут приводить к эффективным потенциалам, зависящим от времени, и, следовательно, нейтрон в этом случае будет менять свою энергию. Отметим, что это приближение будет правильно описывать процесс рассеяния нейтрона до тех пор, пока переданная энергия мала относительно энергии рассеивателя.

Отметим также, что уравнение /5/ правильно описывает упругое рассеяние в первом борновском приближении.

Рассмотрим когерентное квазиупругое рассеяние нейтронов на солитонах на самом простом примере: рассеяние на одномерной цепочке с периодом a. Каждая частица цепочки совершает гармоническое колебание около равновесного положения в направлении $\vec{u}_0$.

Для оценок, как и в [1,2], возьмем $\hbar\omega = 0{,}21$ эВ /1600 $см^{-1}$/. Стационарные состояния гармонического осциллятора описываются в терминах полиномов Эрмита. Нам необходимы волновые функции основного и первого возбужденного состояний ϕ_0, ϕ_1:

$$\phi_0(\vec{r}_n - \vec{r}_n^{\,o}) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-u_n^2/2}, \quad \phi_1(\vec{r}_n - \vec{r}_n^{\,o}) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-u_n^2/2}, \qquad /8/$$

$$\vec{r}_n - \vec{r}_n^{\,o} = \vec{u}_n, \quad u_n = \vec{u}_0 \cdot \vec{u}_n.$$

Диполь-дипольное взаимодействие между "молекулами" порядка 10 $см^{-1}$ приводит к образованию вибрационного экситона. Как хорошо известно[9], волновая функция экситона в нулевом приближении имеет вид

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N) = \sum_{n=1}^{N} c_n(t) \psi_n(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N), \qquad /9/$$

где

$$\psi_n(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) = \prod_{m=1}^{N}{}' \phi_0(\vec{r}_m) \phi_1(\vec{r}_n). \qquad /10/$$

Если ψ описывает обычный экситон, то

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i(kna - \omega(k)t)}. \qquad /11/$$

В случае солитона ψ описывает его "экситонную" часть и выражается формулой

$$c_n^s(t) = \sqrt{\frac{a}{2\Delta}} \frac{\exp(ika(n - n_0) - i\omega^s t)}{\mathrm{ch}\left(\frac{a(n - n_0) - vt}{\Delta}\right)}, \qquad /12/$$

где $\Delta = n_s a$ - ширина солитона, v - скорость солитона. Эффективный потенциал взаимодействия нейтрона с цепью в приближении псевдопотенциала Ферми можно представить следующим образом:

$$V(\vec{r},t) = \sum_{n=1}^{N} \frac{2\pi\hbar b}{m} \int \delta(\vec{r}-\vec{r}_n)|\psi(\vec{r}_1,\dots,\vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N, \qquad /13/$$

где m - приведенная масса ядра и нейтрона, b - нейтронная амплитуда рассеяния. После интегрирования получаем:

$$\tilde{V}(\vec{r},t) = \frac{2\pi\hbar^2 b}{m} \sum_{n=1}^{N} \rho_n(\vec{r},t), \qquad /14/$$

где

$$\rho_n(r,t) = |c_n^s(t)|^2 \left[|\phi\ (r-r_n^o)|^2 - |\phi_0(r-r_n^o)|^2\right]. \qquad /15/$$

В ρ_n опущено не зависящее от времени слагаемое, которое дает вклад в упругое рассеяние.

В первом борновском приближении сечение рассеяния выражается через матричные элементы эффективного потенциала:

$$\langle p|\tilde{V}(\vec{r},t)|p_0\rangle = \int e^{\frac{i(\vec{p}_0-\vec{p})\cdot\vec{r}}{\hbar}} \tilde{V}(\vec{r},t)\, d\vec{r}, \qquad /16/$$

где $\vec{p}_0$, $\vec{p}$ - импульсы нейтрона до и после рассеяния. При помощи /15/ получаем после интегрирования:

$$\langle p|\tilde{V}(\vec{r},t)|p_0\rangle = \frac{2\pi\hbar^2 b}{m} F_\Delta(q) \sum_{n=1}^{N} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_n^o} |c_n(t)|^2, \qquad /17/$$

где введены следующие обозначения:

$$\vec{q} = \frac{\vec{p}-\vec{p}_0}{\hbar}, \quad F_\Delta(q) = e^{-q_u^2/4}\, q_u^2, \quad q_u = \vec{u}_0\cdot\vec{q}.$$

Далее, используя теоремы свертки теории интегралов Фурье[10], просуммируем по n. В результате получаем:

$$\langle p|\tilde{V}(\vec{r},t)|p_0\rangle = \qquad /18/$$

$$= \frac{2\pi\hbar b}{m} F_\Delta(q) \sum_{m=0,\pm1,\pm2,\dots} e^{-i(q_a - \frac{2\pi m}{a})vt} f\left[(q_a - \frac{2\pi m}{a})\Delta\right],$$

где

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{e^{-ikx}}{ch^2(x)} = \frac{2k\pi}{sh(\frac{k\pi}{2})}, \quad q = \vec{q}\cdot\frac{\vec{a}}{a}. \qquad /19/$$

Отметим, что /18/ получено при условии $N\to\infty$, и максимумы в пространстве q не перекрываются, что имеет место, когда $\Delta \gg a$, что и предполагается в теории молекулярных солитонов[1,2].

Матричный элемент потенциала гармонически зависит от времени, что позволяет получить известную формулу для вероятности перехода в единицу времени:

$$d\omega_{pp_o} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_q^m|^2 \delta(E_p - E_{p_o} - \omega_q^m\hbar)\, d\vec{p}, \qquad /20/$$

где M_q^m - матричный элемент потенциала /21/ без зависящей от времени части, $\omega_q^m = (q_a - \frac{2\pi m}{a})v$.

При помощи /20/, нормируя падающую нейтронную волну на единицу потока, а рассеянную - на δ-функцию, получим двойное сечение рассеяния:

$$\frac{d\sigma^m}{d\Omega\, dE_p} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\mu}{\hbar^4} \frac{p}{p_0} |M_q^m|^2 \delta(E_p - E_{p_o} - \omega_q^m\hbar), \qquad /21/$$

где μ - приведенная масса нейтрона и всей цепочки.

Используя /18/, получим окончательно:

$$\frac{d\sigma^m}{d\Omega\, dE_p} = \frac{p}{p_0} b^2 (\frac{\mu}{m}) e^{-W(q)} q_u^4 \frac{2\pi(q_a - \frac{2\pi m}{a})\Delta}{sh(\frac{(q_a - \frac{2\pi m}{a})\Delta}{2})} \delta(E_p - E_{p_o} - \omega_q^m\hbar), \qquad /22/$$

$$W(q) = q_u^2/2.$$

Видно, что сечение пропорционально q_u^4. Если измерять неупругое когерентное рассеяние вблизи 1-го максимума, то

$$q_u = q\cdot u_0 - \frac{2\pi}{a} u_0, \qquad /23/$$

где u_0 - амплитуда гармонического осциллятора ($u_0 \sim \frac{a}{20}$). Для сравнения укажем, что обычное однофононное когерентное рассеяние нейтронов пропорционально q_u^2, поэтому сечение рассеяния на солитонах /21/ примерно на порядок меньше однофононного. Рассмотрим, как будет проявляться в сечении рассеяния расплывание солитона во времени. Для простоты будем считать, что ширина солитона изменяется линейно со временем:

$$\Delta = \Delta_0 + ct, \quad c = \text{const.} \tag*{/24/}$$

Как и выше, для расширяющегося волнового пакета можно рассчитать матричный элемент эффективного потенциала, который будет иметь вид

$$\langle p|\tilde{V}(\vec{r},t)|p_0\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{m} bF_\Delta(q) \times \tag*{/25/}$$

$$\times \sum_{m=0,\pm1,\pm2,\dots} e^{-i(q_a - \frac{2\pi m}{a})vt} \frac{\pi(q_a - \frac{2\pi m}{a})(\Delta_0 + ct)}{\mathrm{sh}\,\dfrac{(q_a - \frac{2\pi m}{a})(\Delta_0 + ct)}{2}} .$$

Отличие от стационарного режима заключается в том, что матричный элемент при фиксированном q стремится к нулю при $t \to \infty$. Случай, когда скорость нейтрона намного больше скорости c, тривиален. Действительно, за время пролета нейтрона через мишень Δ мало изменится и эффект расплывания можно будет учесть путем усреднения сечения рассеяния по всем возможным Δ. Учет скорости расплывания пакета существен в том случае, когда она равна или больше скорости нейтрона, что проявляется при вычислении амплитуды вероятности перехода:

$$a_{pp_0} = \frac{-i}{\hbar} \int_0^t e^{-i(E_{p_0} - E_0)t'/\hbar} \langle p|\tilde{V}(t')|p_0\rangle\, dt', \tag*{/26/}$$

которая при $t > \tau$ /τ - время жизни пакета/ практически перестает зависеть от времени. Таким образом, для плотности вероятности перехода имеем:

$$|a_{pp_0}|^2 = \frac{(2\pi\hbar b)^2\, 2|F_\Delta|^2}{(\pi q_m c/2)^2} \frac{e^{-\pi|q_m|\Delta}}{1 + \left(\dfrac{E_p - E_{p_0} - \hbar q_m V}{\hbar\pi q_m c/2}\right)^2} . \tag*{/27/}$$

Отметим, что /27/, с целью упрощения выкладок и получения удобной для интерпретации формулы, получено при замене функции $x/\mathrm{sh}x$ на e^{-x}. Резонансный характер /27/ как функции энергии показывает, что время затухания:

$$\tau = (\pi|q_m|c/2)^{-1} . \tag*{/28/}$$

Поделив /27/ на время затухания, получаем вероятность перехода в единицу времени, а затем и сечение рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega\, dE_p} = \frac{p}{p_0}\left(\frac{\mu}{m_0}\right)^2 \frac{b^2\, 2|F_\Delta|^2}{\hbar\pi|q_m|c/2} \frac{e^{-\pi|q_m|\Delta}}{1 + \left(\dfrac{E_p - E_{p_0} - \hbar|q_m| V}{\hbar\pi|q_m|c/2}\right)^2} . \tag*{/29/}$$

Отметим, что для получения окончательного результата для макроскопической системы, рассматриваемой в "газовом" приближении, надо умножить /29/ на число волновых пакетов, присутствующих в данный момент.

Сравнивая /29/ и /22/, мы убеждаемся, что при учете затухания линия солитона расширяется, но полная интенсивность не меняется /в пересчете на один постоянно живущий солитон/.

Квазиупругое рассеяние, которое мы рассмотрели, не связано с рождением или уничтожением квазичастиц, а лишь с квазиклассическими аспектами движения волновых пакетов. При движении волнового пакета адиабатически меняется квантовое состояние рассеивающих центров и это является причиной рассматриваемого нами рассеяния.

ЛИТЕРАТУРА

1. Давыдов А.С., Супрун А.Д. УФЖ, 1974, т.19, с. 44; Давыдов А.С. УФН, 1982, т. 138,с. 1137.
2. Федянин В.К., Якушевич Л.В. ОИЯИ, Р17-81-100, Дубна, 1981; Int.Journ. of Quantum Chem., 1982, т.6, с. 302.
3. Kjems J.K., Steiner M. Phys.Rev.Lett., 1978, vol.41, p. 1137.
4. Адамян В.М., Митлер А.Л. УФЖ, 1981, т. 26, с. 317.
5. Рашба Э.М. Оптика и спектроскопия, 1957, т. 2, с. 74, 88.
6. Френкель Я.И. ЖЭТФ, 1936, т. 6, с. 647; Собрание избранных трудов, Изд. АН СССР, М., 1958, т. 2, с. 183.

7. Давыдов А.С. Теория поглощения света в молекулярных кристаллах. Изд. АН УССР, Киев, 1951.
8. Боголюбов Н.Н. УМЖ, 1950, т. 2, с. 3; Тябликов С.В. ЖЭТФ, 1951, т. 21, с. 377.
9. Агранович В.М. Теория экситонов, "Наука", М., 1968.
10. Вайнштейн Б.К. Дифракция рентгеновских лучей на цепных молекулах. Изд. АН СССР, М., 1963.

Рукопись поступила в издательский отдел
23 мая 1984 года.

Светогорски Д.А., Федянин В.К. Р17-84-356
Теоретическое рассмотрение рассеяния нейтронов на солитонах в молекулярных цепочках

Изучалось сечение рассеяния тепловых нейтронов на вибрационном солитоне в одномерном молекулярном кристалле /простая модель α-спиральных полипептидов/ с целью выяснения возможности экспериментального обнаружения солитонов и доказательства их стабильности. Расчет проводился в квазиупругом приближении как для стабильного, так и для "распадающегося" солитона. Сечение рассеяния на солитоне оказалось на один-два порядка меньше, чем на вибрационном экситоне. Это обстоятельство, вместе с весьма специфическими условиями возбуждения солитонов, сильно затрудняет экспериментальные исследования. Сечение рассеяния на "распадающемся" солитоне отличается от сечения стабильного обычным уширением спектра рассеянных нейтронов, но вследствие теплового уширения его измерение проблематично.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Svetogorski D.A., Fedyanin V.K. P17-84-356
Theoretical Consideration of Neutron Scattering on Solitons in Molecular Chains

The cross section of thermal neutrons scattered on a vibrational soliton in one-dimensional molecular crystal (a simple model of α-helical polypeptides) is studied in order to ascertain if there is a possibility to find solitons experimentally and to prove their stability. The calculations were performed is the framework of the quasielastic approximation both for the stable and "decaying" soliton. Soliton cross section turned out to be by one-two orders less than that on the vibrational exciton. This fact, as well as the specific condition for soliton excitation, makes the experimental investigation of solitons very difficult. The cross section of the "decaying" soliton differs strongly from that of the stable one by a simple widening of the scattered neutron spectrum, but because of thermal widening its measurement would not be certain.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984