

Національна Академія наук України
Інститут теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова

На правах рукопису

ЄРЕМКО
Олександр Олександрович

САМОУЗГОДЖЕНІ СТАНИ КВАЗІЧАСТИНОК
ТА ДЕФОРМАЦІЇ ГРАТКИ В ОДНОВИМІРНИХ
МОЛЕКУЛЯРНИХ СИСТЕМАХ

01.04.02 – теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття вченого ступеня
доктора фізико-математичних наук

Київ - 1996

530.1

ЛННБ України ім.В.Стефаника



00753870 (U)

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова Національної Академії наук України. -

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор
БІЛОКОЛОС Євгеній Дмитрович,
доктор фізико-математичних наук, професор
ПАШИЦЬКИЙ Ернест Анатольович,
доктор фізико-математичних наук,
УКРАЇНСЬКИЙ Іван Іванович.

Провідна організація: Національний університет ім. Тараса
Шевченка, м. Київ.

Захист відбудеться "5" грудня 1996 р. о(б) 11⁰⁰ на
засіданні спеціалізованої вченої ради Д 01.76.01 при
Інституті теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова Національної
Академії наук України (252143, Київ-143, вул. Метрологічна,
14-б)

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці Інституту
теоретичної фізики НАН України.

Автореферат розісланий "25" жовтня 1996 р.

Вчений секретар
спеціалізованої ради
доктор фіз.-мат. наук

В.Є.КУЗЬМИЧЕВ

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність проблеми. В останні десятиріччя досягнуто великого прогресу у галузі синтезу сполук, як органічних так і неорганічних, які мають квазіодновимірні властивості і являють значний науковий та прикладний інтерес. Серед органічних сполук можна вказати солі тетраціанокуїнодіметана (вперше синтезованим представником сімейства сполук TCNQ є TTF-TCNQ), допіровані поліацетилени та полідіацетилени, солі тетраметілтетраселенфулвалена $(TMTSF)_2X$ (серед яких перший органічний надпровідник $(TMTSF)_2PF_6$) та інш. До неорганічних квазіодновимірних матеріалів відносяться, наприклад, трихалькогеніди перехідних металів $(NbSe_3, TaS_3, NbS_3)$ та тетрахалькогени галогенів перехідних металів $(MX_4)_n h_y$, де $M = Nb$ або Ta , $X = S$ або Se , а $h = I, Br$ або Cl , а також сполуки $K_{0,3}MoO_3$ і $Rb_{0,3}MoO_3$, які одержали назву "синя бронза".

Експериментальні дослідження підтвердили основні предбачення теорії, яка раніше розглядала одновимірні системи як гіпотетичні. Так, експериментально виявлені такі явища, як переходи Пайєрлса, формування хвилі зарядової густини Фрєо-ліха та інші. Значні досягнення у галузі синтезу і експериментального вивчення квазіодновимірних матеріалів, в свою чергу, стимулювали теоретичні дослідження. Таким чином, фізика квазіодновимірних матеріалів сформувалась у нову галузь фізики конденсованого стану, яка інтенсивно розвивається.

Дослідження одновимірних молекулярних систем, розглянутих у дисертації, актуальне також з точки зору біологічного застосування у зв'язку з проблемою переносу енергії і заряду в біосистемах. Велике поширення здобула запропонована О. С.

І. В. Стефанія
АН України

Давидовим солітонна концепція енерготранспорту вздовж альфа-спіральних білкових молекул, які за своєю структурою відносяться до одновимірних молекулярних систем.

Формування солітона та хвилі зарядової густини, як і багато інших ефектів, обумовлено взаємодією носіїв (екситонів, електронів або дірок) з коливаннями ґратки. Взагалі електрон (або екситон)-фононна взаємодія відіграє фундаментальну роль в фізиці конденсованого стану. Тому вивчення взаємодії квазічастинок з коливаннями ґратки у одновимірних молекулярних структурах є дуже важливою проблемою, якій приділяється велика увага і присвячується багато робіт. Але, не зважаючи на значні досягнення у цій галузі, ряд питань як суто теоретичних, так і пов'язаних з поясненням експериментальних спостережень, залишається не достатньо з'ясованим.

Мета роботи полягає у розвитку теорії самоузгоджених станів квазічастинок (екситонів, електронів або дірок) та деформації ґратки одновимірних молекулярних систем, що теоретично описуються у рамках адіабатичного наближення. При цьому необхідно встановити умови, при яких це наближення буде вірним, і визначити ті сполуки, до яких воно може бути застосовано. Основним же завданням дисертації є дослідження в адіабатичному наближенні властивостей самоузгоджених одночастинкових (солітонних) та багатоелектронних (хвиля зарядової густини) станів, їх взаємодії із зовнішніми полями і на цій основі вказати можливості експериментального дослідження солітонів і пояснити ряд експериментальних спостережень, що стосуються поведінки хвиль зарядової густини у реальних квазіодновимірних матеріалах.

Наукова новизна та практична цінність роботи. В дисер-

тації вперше запропоновано формулювання адіабатичного наближення в представленні вторинного квантування. Це дозволяє в єдиному підході розглядати системи з довільним числом частинок (квазічастинок) і з довільним законом їх дисперсії в зоні, а коректне виділення в гамільтоніані неадіабатичних членів дозволяє оцінити ступень застосовності адіабатичного наближення.

Вперше на основі варіаційного підходу досліджено основний стан одновимірної електрон/екситон-фононої системи при довільній силі зв'язку з визначенням областей, де працюють три різних наближення в гамільтоніані Фр'юліха і де реалізуються три різних типи основного стану квазічастинки. Це дає змогу класифікувати квазіодновимірні сполуки при відомих значеннях їх параметрів: ширині квазічастинкової зони, частоті фононів та константі зв'язку.

Вперше показано, що солітонний стан може формуватися незалежно від знаку ефективної маси квазічастинки. Досліджені властивості солітонних станів у складних одновимірних системах таких, як альфа-спіральні білкові молекули та бінарні лінійні ланцюги.

Розвинута теорія збурень для солітонів, що описуються системою рівнянь, яка не є повністю інтегрованою. Одержані рівняння описують динаміку солітонів під дією зовнішніх сил з урахуванням "радіаційних" поправок, тобто з урахуванням реакції пружної підсистеми на прискорення солітона. Крім того, що при цьому одержується вірна динамічна маса солітона, "радіаційні" поправки призводять до ефектів "радіаційного" гальмування солітонів і їх прискорення зовнішньою звуковою хвилею, які можуть бути досліджені експериментально.

Вперше досліджено взаємодію солітонних станів з електромагнітним полем. Це дало змогу вказати на можливість експериментального дослідження солітонних станів по спектрах випромінювання, поглинання і комбінаційного розсіяння світла, а також запропонувати гіпотезу про молекулярний механізм біологічної дії електромагнітних коливань міліметрового діапазону.

На основі точного розв'язку системи нелінійних рівнянь, що описують самоузгоджений стан деформації і електронів провідності в одновимірному провіднику, досліджено стан хвилі зарядової густини (ХЗГ) при нульовій температурі та температурна поведінка конденсату ХЗГ. Це дозволяє без додаткових припущень пояснити цілий ряд експериментальних спостережень, які не мали свого задовільного тлумачення.

Наукова і практична цінність роботи визначається фундаментальним характером проблем, що вивчаються, можливістю використання отриманих результатів для пояснення наявних експериментальних фактів та постановки нових експериментів.

Апробація роботи. Результати роботи доповідались та обговорювались на наукових сесіях Інститута теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова НАН України і на семінарах відділу систем багатьох частинок ІТФ НАН України, а також на республіканських і міжнародних конференціях: III Республіканська школа-семінар "Спектроскопія молекул і кристалів" (Мукачево, 18-27 травня 1977 р.); Радянсько-американський симпозиум по теорії солітонів (Київ, 4-16 вересня 1979 р.); XIV Всесоюзний семінар "Екситони в кристалах" (Львів, 1-3 жовтня 1979 р.); V Республіканська школа-семінар "Спектроскопія молекул і кристалів" (Черкаси, 7-16 липня 1981 р.) VI Республікансь-

ка школа-семинар "спектроскопія молекул і кристалів" (Чернігів, 20-29 серпня 1983 р.); II Міжнародна нарада по нелінійним і турбулентним процесам (Київ, 10-24 жовтня 1983 р.); Всесоюзна конференція "Молекулярні механізми біологічної дії оптичного випромінювання" (Ялта, 24-26 квітня 1984 р.); I Республіканська конференція по біофізиці (Молдавія, Кишинів, 2-3 липня 1984 р.); Сесія наукової ради АН СРСР по проблемі "Когерентна та нелінійна оптика" (Кишинів, 3-4 грудня 1984 р.); VIII Республіканська школа-семинар "Спектроскопія молекул і кристалів" (Полтава, 3-12 вересня 1987 р.); Міжнародна робоча нарада "Самозахват вібраційної енергії в білках" (Данія, Хантсхольм, 31 липня - 4 серпня 1989 р.); I Європейська школа "Транспортні властивості в нелінійних середовищах" (Данія, Лінгбі, 7-25 серпня 1989 р.); Робоча нарада "Збуджені поляронні стани в конденсованих середовищах" (Пуціно Московської обл., 14-17 лютого 1989 р.); Міжнародна конференція "Майбутні напрямки нелінійної динаміки в фізичних і біологічних явищах" (Данія, Лінгбі, 23 липня-1 серпня 1992 р.); XI Українська школа-семинар "Спектроскопія молекул і кристалів" (Харків, 10-16 травня 1993 р.); Міжнародна конференція "Фізика в Україні" (Київ, 22-27 червня 1993 р.); Міжнародна конференція "Нелінійні когерентні структури в фізиці і біології" (Шотландія, Единбург, 10-14 липня 1995 р.).

Публікації. Матеріали дисертації викладені у 28 публікаціях. Список основних публікацій наведено у кінці автореферату.

Структура та обсяг дисертаційної роботи. Дисертація складається із Вступу, чотирьох глав, які містять 23 параграфи, Висновків та списку цитованої літератури. Дисертаційна

робота викладена на 252 сторінках і ілюстрована 13-ма малюнками. Нумерація параграфів і малюнків сквозна. Бібліографія містить 322 найменування.

Особистий внесок автора. Викладені в дисертації результати одержані автором або самостійно (формулювання адиабатичного наближення в представленні вторинного квантування, дослідження взаємодії солітонів із зовнішньою електромагнітною хвилею, дослідження стану хвилі зарядової густини), або у рамках співробітництва з О. С. Давидовим, Л. С. Брижик, Ю. Б. Гайдідесем і О. О. Вахненко на рівних засадах та з О. І. Сергієнко, в якому автор, як керівник, відігравав провідну роль.

КОРОТКИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У Вступі обгрунтована актуальність теми дисертації та зроблено короткий історичний огляд літератури по фізиці квазіодновимірних матеріалів взагалі і по конкретним проблемам, що пов'язані з темою роботи і включають такі питання, як теорія автолокалізованих станів в кристалах, теорія солітонів та фізика колективного стану хвилі зарядової густини в одновимірних молекулярних структурах. Тут також окреслено коло теоретичних досліджень, як адиабатичне наближення в гамільтоніані Фр'юліха, і коротко викладено зміст дисертації за главами.

Перша глава присвячена дослідженню стаціонарних автолокалізованих станів солітонного типу в молекулярних одновимірних структурах типу простого (одноатомного) ланцюжка, бінарного (двоатомного) лінійного ланцюга і альфа-спіральної білкової молекули, яка моделюється структуров з трьома атомами в елементарній комірці.

Автолокалізація квазічастинки в кристалі є наслідком її

взаємодії з коливаннями ґратки. Тому у першому параграфі формулюється конкретний вигляд гамільтоніану Фр'оліхівського типу

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph} \quad (1)$$

який описує стани квазічастинок (екситонів, електронів чи дірок), що взаємодіють з фононами, в молекулярному ланцюжку. В загальному випадку одновимірної періодичної молекулярної системи гамільтоніан (1) можна представити у вигляді

$$H = \sum_{jk} E_j(k) B_{jk}^+ B_{jk} + \sum_{sq} \hbar \Omega_{sq} b_{qs}^+ b_{qs} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{ijk} \sum_{sq} \chi_{ij;s}(k, q) B_{ik}^+ B_{jk-q} (b_{qs} + b_{-qs}^+)$$

(2)

Тут B_{jk}^+ і B_{jk} - оператори породження і знищення квазічастинки з хвильовим вектором k і енергією $E_j(k)$ у j -тій енергетичній зоні, b_{qs}^+ і b_{qs} - оператори породження і знищення фонона s -тої гілки нормальних коливань з хвильовим числом q і частотою Ω_{sq} , а функція $\chi_{ij;s}(k, q)$ характеризує зв'язок квазічастинок з фононами. Явний вигляд залежності енергій квазічастинок, фононних частот і функцій зв'язку від хвильових векторів визначається моделлю одновимірної системи, що розглядається. При цьому треба зауважити, що в одновимірному випадку достатньо хорошим припущенням є припущення взаємодії найближчих сусідів.

У випадку простого одноатомного ланцюжка при урахуванні лише одного електронного рівня (або одного збудженого стану), достатньо відокремленого від інших, для квазічастинки будемо мати одну енергетичну зону, а нормальним коливанням ґратки буде відповідати лише одна акустична фононна гілка.

Розв'язок рівняння Шрьодінгера з гамільтоніаном Фр'олі-ха (1) навряд чи може бути знайдений точно навіть для одновимірної моделі. Але якщо представити повний гамільтоніан у вигляді $H = H_0 + \epsilon V$, де для H_0 відомий точний розв'язок, а ϵV можна вважати малим, то з'являється можливість застосувати підхід теорії збурень. У гамільтоніані (1) є три можливості виділення доданку, який можна покласти малим, і відповідно можна розвинути три варіанти теорії збурень.

Першим варіантом теорії збурень, що широко застосовується, є випадок слабого електрон(екситон)-фононного зв'язку, коли в гамільтоніані (1) малим доданком вважається сам оператор взаємодії H_{e-ph} . В цьому випадку квазічастинка залишається майже вільною, але в наслідок розсіювання на фононах її довжина вільного пробігу стає скінченною, а енергія та ефективна маса перенормовуються.

У двох інших варіантах вже нульове наближення враховує суттєву перебудову основного стану квазічастинки і відносяться вони до галузі, яка перетворилась у широке поле досліджень і може бути окреслена, як фізика автолокалізованих станів. Схематично, не вдаючись до тонкощів, можна вказати, що в одному з цих варіантів малим вважається оператор, що описує рух електрона або екситона по вузлах ґратки за рахунок обмінної чи резонансної взаємодії (кінетична енергія квазічастинки у вузельному представленні), а в іншому малим вважається оператор кінетичної енергії коливань ґратки (адиабатичне наближення). У цих двох граничних випадках як математичні методи, так і фізична картина суттєво різні і відносяться вони до двох напрямків теорії автолокалізованих станів, які іноді відповідно називають як "теорія поляронів ма-

лого радіуса" та "теорія поляронів великого радіуса". Можна зауважити, що оскільки ці два випадки відповідають різним нульовим наближенням у гамільтоніані Фр'юліха (1), то їх відмінність більш глибока ніж просто різниця у розмірах локалізації.

Для "полярону малого радіуса" сам термін "автолокалізація" не досить вірний. Насправді ж через наявність трансляційної симетрії в ідеальному кристалі виникають стани типу узагальнених блохівських хвиль з відповідними енергетичними зонами. Але ширина цих зон мала і експоненційно зменшується при зростанні константи зв'язку. Тому зони "поляронів малого радіуса" можуть руйнуватись навіть при невеликих концентраціях домішок та при невисоких температурах, а процеси переносу мають некогерентний характер. Але при температурі абсолютного нуля в ідеальному кристалі енергія основного блохівського стану завжди буде менша за енергію локалізованого при будь-якій скінченій ширині зони.

Інша картина відповідає "поляронам великого радіуса", коли застосовується адіабатичне наближення. Послідовна трансляційно інваріантна теорія адіабатичного наближення з коректним виділенням в гамільтоніані неадіабатичних членів була розвинута Боголюбовим [1] і Тябліковим [2] для чисто континуальної моделі однієї частинки, що взаємодіє з бозонним полем. Трансляційно інваріантна хвильова функція Боголюбова описує частинку з повністю невизначеними координатами (тобто частинка з рівною ймовірністю може знаходитись будь-якому місці). Виявляється, що рівняння нульового адіабатичного наближення Боголюбова, які визначають енергію частинки і її внутрішні параметри, повністю співпадають з рівняннями

"полукласичної" теорії [3], де трансляційно інваріантні рівняння призводять до хвильової функції, яка описує реальну автолокалізацію частинки в довільній точці. Тобто, якщо залишатись у рамках нульового адіабатичного наближення, трансляційно інваріантний стан і стан з порушеною симетрією мають однакову енергію. Це типова картина спонтанного порушення симетрії.

Роботи Боголюбова і Тяблікова мають велике принципове значення, але узагальнення боголюбівського підходу і застосування його до більш складних систем (багаточастинкова система або дискретна кристалічна ґратка) наштовхується на ряд принципових труднощів. Це пов'язано з тим, що перехід Боголюбова до нових змінних з виділенням координати, канонічно спряженій оператору повного імпульсу системи, не є канонічним перетворенням координат. Тому, починаючи з работ Пекара [3], звичайно застосовують полукласичну теорію як нульове адіабатичне наближення. В цьому наближенні задача знаходження хвильової функції принципово розв'язується точно, а в одновимірному випадку маємо явний аналітичний розв'язок. Але при цьому немає змоги вказати рамки застосовності самого підходу. В той же час, як показано в дисертації, в рамках адіабатичного підходу Борна-Оппенгеймера з урахуванням можливості спонтанного порушення симетрії можна досить просто виділити неадіабатичну частину в гамільтоніані (2) і розвинути теорію збурень для частинки з довільним законом дисперсії і в рівній мірі розглядати стани з довільним числом частинок.

Як відомо, адіабатичному наближенню Борна-Оппенгеймера відповідає хвильова функція у вигляді добутка електронної хвильової функції, яка залежить від рівноважної конфігурації

ядер в данному електронному стані, та функції, що описує ко-
ливання ядер навколо рівноважних положень, які самі залежать
від стану електронів. Відповідно до цього, будемо шукати
хвильову функцію у вигляді

$$|\Psi\rangle = S|\psi\rangle, \quad (3)$$

де унітарний оператор

$$S = \exp\left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q (\beta_q b_q^\dagger - \beta_q^* b_q)\right) \quad (4)$$

визначає перенормування основного стану ґратки за рахунок
взаємодії квазічастинки з фононами і сам буде залежати від
стану, в якому знаходиться квазічастинка. Використовуючи (3)
і шукаючи стаціонарний стан, який відповідає певному значен-
ню повного імпульса системи P, природнім чином приходимо до
рівняння

$$S^*(H - VP)S|\Psi\rangle = H|\Psi\rangle = E_p |\Psi\rangle. \quad (5)$$

У випадку однозонної моделі (простого ланцюжка) унітар-
не перетворення

$$B_k = \sum_j \Psi_j(k) A_j, \quad \sum_k \Psi_j^*(k) \Psi_j(k) = \delta_{1j}. \quad (6)$$

в якому коефіцієнти $\Psi_j(k)$ є розв'язками рівнянь

$$[E(k) - \hbar v k] \Psi_j(k) + \frac{1}{N} \sum_q \chi(k, q) (\beta_q + \beta_{-q}^*) \Psi_j(k - q) = \quad (7)$$

$$= E_j \Psi_j(k). \quad (15)$$

частково діагоналізує оператор енергії H і він може бути
представлений у вигляді

$$\tilde{H} = S^*(H - VP)S = H_0 + H_1.$$

Тут

$$H_0 = W + \sum_j [E_j + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q f_{j,j}(q)(b_q + b_{-q}^*)] A_j^+ A_j + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \hbar(\Omega_q - Vq)(\beta_q b_q^+ + \beta_q^* b_q) + \sum_q \hbar(\Omega_q - Vq) b_q^+ b_q \quad (8)$$

- діагональна по адиабатичним термам частина гамільтоніана,

а

$$H_1 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{1 \neq j, q} f_{1,j}(q) A_1^+ A_j (b_q + b_{-q}^*) \quad (9)$$

- оператор неадиабатичності, який обумовлює переходи між адиабатичними термами за участю фононів.

Якщо вважати оператор неадиабатичності (9) малим і знехтувати ним, то в нульовому адиабатичному наближенні вектор стану

$$|\Psi_0\rangle = \prod_j \frac{1}{\sqrt{n_j!}} (A_j^+)^{n_j} |0\rangle, \quad \sum_j n_j = N_e \quad (10)$$

що описує систему N_e частинок при довільній конфігурації, буде власним вектором оператора (8) з власним значенням

$$E_p = W + \sum_j n_j E_j \quad (11)$$

при умові, що коефіцієнти β_q в (4) задовільняють рівності

$$\begin{aligned} \hbar(\Omega_q - Vq)\beta_q &= - \sum_j n_j f_{j,j}^*(q) = \\ &= - \sum_j \chi^*(k, q) n_j \Psi_j^*(k-q) \Psi_j(k) \end{aligned} \quad (12)$$

Підставляючи визначені таким чином значення β_q в рівняння (7), приходимо до системи нелінійних рівнянь для заселених станів. У випадку однієї частинки рівняння (7), з ура-

хуванням (12), зводиться в довгохвильовому наближенні до не- лінійного рівняння Шрьодінгера, яке має відомий автолокалі- зований розв'язок, що описує давидовський солітон

$$|\Psi(t)\rangle = S(t) \sum_n \psi_n(t) B_n^+ |0\rangle \quad (13)$$

де

$$\psi_n(t) = \frac{\sqrt{\alpha a} \exp\{-i[E_s(V)t - (k+k_0)an]\}}{2 \operatorname{ch}[(\alpha/2)(an - Vt - x_0)]} \quad (14)$$

Як бачимо, цей розв'язок описує квазічастинку, яка ло- калізована в околиці $1/\alpha$ деякої точки, що рухається вздовж ланцюга із швидкістю V . Тут k_0 - хвильове число, якому від- повідає дно енергетичної зони, а k визначається швидкістю руху, $\sin ka = V/V_c = \alpha$, де V_c - максимальна групова швид- кість квазічастинки у зоні. Рух квазічастинки супроводжуєть- ся посуванням деформації самого ланцюга. Такий самоузгодже- ний стан квазічастинки і деформації ґратки може рухатись вздовж ланцюга з постійною швидкістю 1, отже, переносити енергію і заряд. При цьому швидкість солітону не може пере- вищувати ні максимальної групової швидкості V_c , ні швидкості звуку V_a у ланцюгу. Параметр локалізації солітона α визнача- ється пружністю ланцюга w , шириною зони $4J$ і величиною взає- модії квазічастинки з фононами χ та залежить від швидкості солітона

$$\alpha = \frac{2 \chi^2}{aJw(1-s^2) (1-\alpha^2)^{1/2}} \quad (15)$$

де $s = V/V_a$. Аналітичний вигляд функції (14) одержано у кон- тинуальному наближенні, яке має на увазі справедливність не- рівності $\alpha a < 1$. Тому швидкість солітона не може бути надто

близькою до граничної швидкості (V_c або V_a) і можна обмежитись так званим "нерелятивістським наближенням", s^2 , $\alpha^2 < 1$.

Солітонний стан (13) буде близьким до дійсного стаціонарного стану, коли вплив оператору неадіабатичності буде малим і ним можна знехтувати. Основними енергетичними параметрами гамільтоніану (1) є напівширина квазічастинкової зони $2J$, характерна або максимальна фононна частота Ω_0 та енергія зв'язку E_b . З цих трьох параметрів можна побудувати два незалежних безрозмірних параметри

$$g = \frac{E_b}{2J} \quad \text{і} \quad \gamma = \frac{\hbar\Omega_0}{J} \quad (16)$$

які можна визначити, відповідно, як константа зв'язку та параметр неадіабатичності. Справедливість того чи іншого наближення в гамільтоніані (1) буде залежити від величини цих параметрів.

Так, в наближенні слабого зв'язку поправками вищого порядку можна знехтувати при умові

$$\frac{E_b}{\sqrt{4J\hbar\Omega_0}} \ll 1, \quad \text{тобто} \quad g \ll \sqrt{\gamma} \quad (17)$$

а в теорії поляронів малого радіуса повинна виконуватись нерівність

$$\frac{J \exp(-W_{F-c})}{\hbar\Omega_0} < 1 \quad (18)$$

де W_{F-c} - Франк-кондонівський фактор пропорційний константі зв'язку.

(81) Неадіабатичні поправки можна оцінити або в рамках теорії Боголюбова [1], або спитаючись на оператор неадіабатичності (9) і показати, що вони будуть малі при умові $Jg^2 \gg \hbar\Omega_{\text{хар}}$. Приймаючи до уваги умову справедливості континуально-

го наближення, приходимо до висновку, що нульове адиабатичне наближення буде обґрунтованим при умові

$$\sqrt{(\hbar\Omega_{\text{хар}}/J)} \ll g \ll 1. \quad (19)$$

Більш детально перехід від одного наближення до іншого можна простежити за допомогою варіаційного підходу. В дисертації викладено результати варіаційних розрахунків енергії основного стану квазічастинки, що взаємодіє з фононами. Розглянуто дві найпростіші одновимірні моделі: взаємодія з акустичними фононами в простому ланцюжку (модель Давидова) та взаємодія з бездисперсійними оптичними фононами (модель Холстейна). Для розрахунків вибиралась пробна варіаційна функція у вигляді

$$|\Psi\rangle = \sqrt{a} \sum_n \Psi(n) S(n) B_n^+ |0\rangle. \quad (20)$$

де

$$S(n) = \exp\left\{ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{qj} [f_{qj}(n)b_{qj}^+ - f_{qj}^*(n)b_{qj}] \right\}. \quad (21)$$

а $\Psi(n)$ та $f_{qj}(n)$ - варіаційні функції, які знаходяться із умови мінімуму енергії. Ця функція в граничних випадках зводиться до функцій згаданих трьох наближень. При $\Psi(n) = \sqrt{(1/aN)} e^{ik_0 n}$ і $f_{qj}(n) = f_{qj} e^{-iq_0 n}$ вона співпадає з варіаційною функцією Лі-Лоу-Пайнса, яка з одного боку при малих f_{qj} зводиться до випадку слабкого зв'язку, а з іншого при певних значеннях f_{qj} співпадає з функцією полярону малого радіуса. А коли параметри $f_{qj}(n) = \beta_{qj}$ не залежать від номера n , (20) зводиться до мультиплікативної апроксимації адиабатичного наближення (13).

Із варіаційних рівнянь для функцій $\Psi(n)$ та $f_{qj}(n)$ можна виключити фононні змінні $f_{qj}(n)$ і записати енергію як функ-

ціонал тільки хвильових функцій квазі-частинки. Але в цей функціонал входить не тільки функція основного стану, який розшукується, а також хвильові функції віртуальних збуджених стаів у самоузгодженому потенціалі. В дисертації був використан прямий варіаційний метод, в якому функція основного стану задавалась у вигляді (14). При цьому однозначно визначається самоузгоджений потенціал і розраховується увесь його спектр. Це дозволяє обчислити енергію як функцію варіаційного параметра локалізації α , що входить в (14), і шукати його із умови мінімуму енергії. Результати комп'ютерної мінімізації представлені в дисертації у вигляді діаграм станів квазі-частинки. На мал.1 представлена така діаграма для квазі-частинки, що взаємодіє з акустичними фононами. На ній визначено три області значень параметрів g_a і γ_a , в яких реалізуються три головних типи основного стану квазічастинки. В областях, що відмічені як I і III, мінімуму енергії відповідає делокалізований стан з $\alpha = 0$. Однак, якщо в області I енергія основного стану близька до енергії майже вільної частинки, то в області III енергія і значення франк-кондонівського фактора близьки до тих, що дає теорія поляронів малого радіуса. Якщо ж параметри ланцюга такі, що значення g_a і γ_a потрапляють до області II, то квазічастинка спонтанно локалізується з певним значенням параметра локалізації α .

Із мал.1 бачимо, що спонтанна локалізація має місце лише при невеликих параметрах неадіабатичності та при поміркованій силі зв'язку квазічастинки з фононами, коли константа зв'язку приймає значення в деякому інтервалі, обмеженому нерівностями

$$g_{a.c1} < g_a < g_{a.c2} \quad (22)$$

Для малих параметрів неадиабатичності, $\gamma_a < 0.5$, нижнє критичне значення константи взаємодії буде: $g_{o,c1} = 1.92 \sqrt{\gamma_o}$ - при взаємодії з оптичними фононами і $g_{a,c1} = (\pi/2) \gamma_a$ - при взаємодії з акустичними фононами. Таким чином, умова адиабатичного наближення (19) узгоджується з нерівністями (22). В подальшому вважається, що умова (19) виконується, і у рамках нульового адиабатичного наближення досліджуються властивості самоузгоджених станів квазічастинок (екситонів та електронів) в одновимірних молекулярних системах. Аналіз експериментальних даних показує, що умова (19) виконується, наприклад, для таких сполук як полідіацетилен та неорганічні квазіодновимірні матеріали, в яких реалізується стан хвилі зарядової густини.

Функція (14) описує солітонний стан в простому одноатомному ланцюгу. Реальні ж лінійні молекулярні системи мають більш ускладнену структуру. Наприклад, така макромолекулярна структура, як альфа-спіральна білкова молекула, що відіграє активну роль у біоенергетиці. О.С.Давидовим був запропонован солітонний механізм переносу енергії і заряду вздовж білків [4]. Ця гіпотеза набула великого поширення і притягалась до пояснення цілого ряду біологічних явищ. Але, в основному використовувалась якісна однозонна модель. Для більш детального теоретичного аналізу необхідно врахувати більш складну структуру альфа-спіралі. В дисертації альфа-спіральна молекула моделювалась квазіодновимірною структурою, яка має три атоми в примітивній комірці, а її вісь є вісь'ю симетрії третього порядку. Ясна річ, що при цьому в гамільтоніані (2) будуть три екситонні зони, з яких дві нижні вироджені. Взаємодія з фононами враховує можливість як повздовжньої (шаг

спіралі), так і поперечної (її радіус) деформації структури. Розв'язок рівнянь, які описують самоузгоджений стан в цій моделі, показує, що в білках можуть існувати солітонні стани виду (14) трьох типів з різними енергіями, ефективними масами та параметрами локалізації. Два перших відносяться до групи симетрії C_3 і по суті являють собою солітонні стани, що відокремились від вихідних екситонних зон. У цих станах збудження розповсюджується по трьом ланцюгам водневих зв'язків, але в одному з них, який відповідає верхній зоні, ланцюги збудженні в фазі, а в іншому, який відповідає нижній виродженій зоні, ланцюги збудженні із зсувом фаз. У зоні солітонного збудження в цих випадках шаг спіралі зменшується, а її радіус збільшується. Але енергетично найбільш вигідним є солітон третього несиметричного типу, коли нарівні із спонтанним порушенням трансляційної симетрії порушується і симетрія C_3 . У солітонах цього типу збудження розповсюджується по двом ланцюгам із трьох, а деформація, яка супроводжує збудження, має більш складний характер з локальним вигином самої молекули.

Іншим прикладом ускладнення простого ланцюга, що викладено в дисертації, є лінійний бінарний ланцюг, який складається із атомів або іонів двох сортів, розташованих на однакових відстанях один від одного у чергуючий послідовності. Наприклад, усі металооксидні матеріали, в яких спостерігається високотемпературна надпровідність, мають купратні шари, де можна виділити такі ланцюги з іонів міді та кисню. Саме до цих ланцюгів були спроби застосувати солітонну концепцію в її якісному вигляді. Вже в простішому наближенні, якщо розглядати такий ланцюг окремо, в його спектрі нормаль-

них коливань будуть як акустична, так і оптична гілки. Якщо у кожному із іонів прийняти до уваги лише по одному ізольованому електронному рівню, то в гамільтоніан (2) увійдуть дві електронні зони. В дисертації наведено розрахунки функцій $\chi_{1j;s}(k, q)$, які характеризують електрон-фононну взаємодію і розглянуто випадок, коли в основному стані система являє собою діелектрик (або напівпровідник) з повністю заповненою валентною зоною і пустою зоною провідності. В цьому випадку провідність ланцюга буде забезпечуватись надлишковими носіями (електронами у зоні провідності, або дірками у валентній зоні), які постачаються донорними, або акцепторними домішками. Аналіз електрон-фононної взаємодії показує, що при великій різниці у масах атомів бінарного ланцюга носії у кожній зоні взаємодіють головним чином лише з однією фононою гілкою. Наприклад, якщо більшу масу має атом з більш високим енергетичним рівнем електрона (саме таке співвідношення виконується у ланцюгах $Cu - O$), то надлишкові дірки головним чином взаємодіють з акустичними фононами, а надлишкові електрони - з оптичними. При оберненому співвідношенні (атом з більш високим електронним рівнем має меншу масу) картина буде протилежною: надлишкові дірки більш інтенсивно взаємодіють з оптичними фононами, а надлишкові електрони - з акустичними.

Квазічастинка, що взаємодіє з акустичними фононами автолокалізується у солітонний стан (14). Взаємодія ж квазічастинки з оптичними фононами не відповідає моделі Холстейна ($\chi_0(k, q) = \text{const}$), бо в довгохвильовому наближенні маємо $\chi_0(k, q) \sim qa$. І дарма що нелінійне рівняння, яке описує самоузгоджений стан, має розв'язок у вигляді локалізованого

стану, енергія деформації при цьому надто велика і повна енергія перевищує енергію делокалізованого стану. Таким чином, в бінарному ланцюгу квазічастинка, що взаємодіє з оптичною гілкою коливань, не локалізується тому що локалізований стан не відповідає абсолютному мінімуму енергії.

Друга глава дисертації присвячена вивченню динамічних властивостей молекулярних солітонів, які в адиабатичному наближенні описуються хвильовою функцією (13). Самі ці властивості виявляються при взаємодії солітонів із зовнішніми полями та іншими степенями вільності системи. Математично дослідження впливу зовнішніх сил провадиться методами теорії збурень. Різні варіанти теорії збурень для солітонів, що описуються повністю інтегрованими нелінійними рівняннями, розвинути у роботах Карпмана і Маслова, Кінера і МакЛафліна та інш. В дисертації розвинута теорія збурень для солітонів, що описуються системою рівнянь

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\chi \varphi(x, t) \right) \Psi(x, t) = \epsilon U(x) \Psi(x, t), \quad (23a)$$

$$\left(v_a^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \rho(x, t) - \frac{2\chi v_a^2}{\omega a} \frac{\partial^2 |\Psi|^2}{\partial x^2} = \epsilon Y' = \epsilon \frac{\partial Y}{\partial x}, \quad (23b)$$

яка не є повністю інтегрованою і де праві частини описують вплив зовнішніх сил і вважаються малим збуренням порядку ϵ . За відсутністю зовнішніх сил ($\epsilon = 0$) ця система еквівалентна системі рівнянь (7) і (12), записаних у лабораторній системі координат в довгохвильовому (континуальному) наближенні. І має солітонний розв'язок (14). Тут тільки перейдено від змінних β_q до фізично більш прозорої змінної ρ , яка характеризує деформацію ланцюга (відхилення відстані між вузлами

ланцюга від рівноважного значення a) при наявності в ньому квазічастинки.

Згідно теорії збурень розв'язок рівняння (23б) шукається у вигляді

$$\rho(x, t) = \frac{2\chi}{w(1-s^2)} |\Psi(x, t)|^2 + \epsilon \rho_1(x, t), \quad (24)$$

де перший доданок був би точним стаціонарним розв'язком при $\epsilon = 0$. Сама ж хвильова функція квазічастинки $\Psi(x, t)$ теж шукається у вигляді розкладу по малому параметру

$$\Psi(x, t) = \Psi_0(x, t) + \epsilon \Psi_1(x, t) + \dots, \quad (25)$$

де $\Psi_0(x, t)$ солітонна функція виду (14). Але врахуємо, можливий вплив зовнішніх сил на залежність від часу її параметрів - фази, параметра локалізації x_0 , хвильового числа k та координати центру солітона r (який в стаціонарному випадку змінюється як $r = Vt + x_0$). Рівняння, що описують еволюцію параметрів солітона, знаходяться із умови відсутності в поправці $\Psi_1(x, t)$ секулярних членів, які можуть зростати з часом. Із цих умов випливає, що при ермітовому збуренні параметр локалізації солітона не змінюється, а динамічне рівняння, що описує його рух під дією зовнішніх сил має вигляд

$$m \frac{d^2 r(t)}{dt^2} + \int_{t_0}^t dt' K(t-t') \frac{d^2 r(t')}{dt'^2} = F. \quad (26)$$

Тут t_0 - початковий момент часу. F - ефективна сила, що діє на солітон з боку зовнішнього поля, а $K(\tau)$ - ядро, яке характеризує реакцію пружної підсистеми на зміну руху солітона і експоненційно спадає при $\tau \gg 1/(\kappa V_A)$. Динамічне рівняння (26) можна переписати як

$$m_s \ddot{r}(t) - \int_0^{\infty} \ddot{r}(t - \tau) K_1(\tau) d\tau = F, \quad (27)$$

де

$$m_s = m + K_1(0) = m + \frac{4 \chi^4}{3w^2 J V_a^2} \quad (28)$$

- динамічна маса солітона, що співпадає з його кінетичною масою, яка характеризує залежність енергії солітона від його швидкості при стаціонарному русі.

В достатньо плавному потенціалі, коли рух солітона буде майже рівномірно прискорений або рівномірно уповільнений і третьою похідною γ можна знехтувати, (27) зводиться до рівняння Ньютона для солітона як класичної частинки з масою m_s (28). Те, що в (27) входить саме маса солітона, а не маса вільної квазічастинки, пов'язано з двохкомпонентністю солітона в молекулярному ланцюгу. Нелінійність цього стану визначається взаємодією квазічастинки з утвореною нею самою деформацією ланцюга, інерційні властивості якого змінюють ефективну масу.

Другий член в лівій частині рівняння (27), хоч і є малим, проте відіграє суттєву роль у тих випадках, коли при русі солітона по ланцюгу присутня осцилююча складова. Для ілюстрації цього в дисертації розглянуто рух солітона в ефективному періодичному потенціалі

$$U_{er}(r) = (U_0/2) [1 - \cos(2\pi r/\lambda)] \quad (29)$$

Якщо початкова кінетична енергія солітона $E_k = m_s v_0^2/2$ буде більша ніж амплітуда потенціалу U_0 , то солітон буде рухатись по ланцюгу з середньою швидкістю V , на яку накладаються осциляції з основною частотою $2\pi V/\lambda$ і її гармоніками. Врахування "радіаційних" поправок, обумовлених другим членом в лівій частині рівняння (27), призводить до того, що серед-

ня швидкість солітона V з часом зменшується. Втрачаючи з плином часу кінетичну енергію, солітон врешті решт зупиниться, захоплений однією із потенціальних ям, де він буде здійснювати затухаючі коливання. Таким чином, при вільному русі солітона над рельєфом періодичного потенціала і при його коливаннях поблизу дна потенціальної ями має місце "радіаційне" гальмування. Це пов'язано з тим, що при коливальному русі солітон генерує звукові хвилі, які розповсюджуються по ланцюгу праворуч і ліворуч від солітона забирають частину його кінетичної енергії.

Іншим проявом "радіаційних" ефектів, розглянутих в дисертації, є ефект звукового тиску на солітон. Якщо солітон знаходиться у полі зовнішньої звукової хвилі, яка розповсюджується по ланцюгу в деякому напрямку і має довжину хвилі λ , то він набуває прискорення в тому ж напрямку, немов на нього діє деяка ефективна сила

$$F_{зв} = \frac{5(2\pi)^2 A^2 \chi^4 a^3}{m_s^2 w v_a^4} \frac{(2\pi^2 / \omega \lambda)^2}{\lambda^4 \sin^2(2\pi^2 / \omega \lambda)} \quad (30)$$

яка має характерну залежність від λ . Цей механізм може бути перевірений в експериментах по реєстрації струму, обумовленого рухом електросолітонів під дією біжучої звукової хвилі.

За допомогою одержаних динамічних рівнянь в цій же главі розглянуто кореляцію руху солітонів у двох паралельних ланцюгах, які пов'язані між собою лише пружними силами, що перешкоджають зсув ланцюгів один відносно іншого. Енергія такої пружної взаємодії між ланцюгами може бути записана в наближенні взаємодії найближчих сусідів із різних ланцюжків

$$W_{12} = (w_{12}/2) \sum_n (u_{1,n} - u_{2,n})^2 \quad (31)$$

де $u_{j,n}$ - зміщення n -того вузла j -того ланцюга із свого рівноважного положення. Така модель може бути застосована до запропонованого О.С.Давидовим солітонного механізму скорочення поперечно-смугастих м'язів. Згідно цієї гіпотези скорочення м'язів відбувається при посуванні солітонного збудження вздовж міозинової молекули. Але в саркомерах міозинові молекули зібрані у пучок, в якому відносний зсув молекул можна моделювати енергією (31). Наявність між ланцюгами цієї взаємодії призводить до того, що між солітонами, які рухаються в різних ланцюгах, виникає ефективна сила притягання і тому рух солітонів по великій кількості міозинових молекул, зібраних у пучок, буде відбуватись узгоджено, підвищуючи ефективність солітонного механізму скорочення м'язів.

Розглянуте вище "радіаційне" гальмування солітонів ма-
буть не є основним у реальних системах, де більш важливу
роль можуть відігравати інші механізми дисипації. Самі моле-
кулярні ланцюги знаходяться у певному оточенні. Так, аль-
фа-спіральні білкові молекули оточені цитоплазмою клітини. А
в квазіодновимірних кристалах основні ланцюги оточені атома-
ми та молекулами матриці. Тому зміщення вузлів ланцюга пов'-
язані із зміщеннями оточуючих атомів. Отже, коливання ланцю-
га можуть віддавати частину своєї енергії на збудження інших
степеней вільності. Ця обставина врахована наприкінці цієї
глави суто феноменологічно за допомогою введення в рівняння
для пружної підсистеми (236) дисипативних членів. Розгляну-
то два випадки сил тертя, що діють на вузли ланцюга - сила
пропорційна швидкості і сила пропорційна квадрату швидкості
зміщення вузла, і визначено закони гальмування вільного руху
солітона при заданій початковій швидкості.

Третя глава дисертації присвячена дослідженню взаємодії молекулярних солітонів з електромагнітним полем з метою визначення характерних рис, які дозволили б ідентифікувати солітонні стани у спектрах випромінювання, поглинання та комбінаційного розсіяння світла.

В першому параграфі цієї глави розглянуто взаємодію дипольно активних солітонів (тобто екситонних солітонів в простому ланцюгу і давидовських солітонів в альфа-спіральних білках) з вакуумом електромагнітного поля. Розрахована ймовірність спонтанного випромінювання світла молекулярним ланцюгом із стану солітонного збудження, яке рухається з деякою швидкістю V . В наслідок розрахунків знайдено, що ймовірність випромінювання фотону з частотою ω в одиницю часу в одиницю тілесного кута під кутом θ до вісі ланцюга дається виразом

$$I(\omega, \theta) = \frac{E_0^2 d^2 \sin^2 \theta \omega F(\omega)}{2 (\hbar c)^3 \pi \epsilon_0 \hbar^2 \{(\pi/\epsilon_0) [(\omega/c) \cos \theta - mV/\hbar]\}} \quad (32)$$

де функція

$$F(\omega) = \operatorname{Re} \int_0^{\infty} dt \exp[-i[\omega - \omega(V) - i\eta]t + g(t)] \quad (33)$$

визначає форму смуги спонтанного випромінювання світла. В цьому виразі $\omega(V) = [E_s(V) - mV^2]/\hbar$, а

$$g(t) = (1/N) \sum_q |\beta_q|^2 (\exp[-i(\Omega_q - Vq)t] - 1). \quad (34)$$

Характерною рисою, пов'язаною з властивостями акустичних коливань в лінійному ланцюгу, є відсутність в (33) безфоновної лінії, а смуга випромінювання має гаусову форму.

Проінтегрувавши (32) по частотам і кутам випромінювання одержимо вираз для радіаційного часу життя солітонного збуд-

ження

$$\tau_s = \tau_{ex} \frac{3\lambda\epsilon}{4\pi^2} c\hbar^2 \left(\frac{\pi mV}{\epsilon \hbar} \right) \quad (35)$$

де τ_{ex} - радіаційний час життя екситонів в молекулярному ланцюгу, а λ - довжина хвилі світла, що випромінює вільна молекула. Оскільки π/ϵ порядку розміру солітона, який значно менш ніж довжина хвилі λ , то радіаційний час життя солітонів значно перевищує цей же час екситонів і збільшується при зростанні його швидкості.

Оцінка радіаційного часу життя солітонів має принципове значення для гіпотези Давидова, згідно з якою солітони в альфа-спіральных білках відіграють роль носіїв енергії, що виділяється під час гідролізу молекул АТФ. Проведені в дисертації оцінки з урахуванням реальної орієнтації дипольних моментів амідних коливань в альфа-спіралі показують, що найбільший радіаційний час життя мають солітони третього несиметричного типу.

Дослідження взаємодії солітонів із зовнішньою електромагнітною хвилею виявили, що як в спектрах поглинання, так і в спектрах комбінаційного розсіяння світла може проявлятися характерна лінія на частоті фотодисоціації солітона. Поглинання енергії в цих процесах супроводжується переходом квазічастинки із зв'язаного солітонного стану у збуджені делокалізовані, тобто відривом квазічастинки від деформації, що її супроводжує. Ймовірність поглинання при цьому визначається формулою

$$P(\omega) = (2/\hbar) \sum_K |E \cdot D_K|^2 F_K(\omega) \quad (36)$$

де $F_K(\omega)$ задається виразом (33), де для частоти $\omega(V)$ маємо

$$\hbar\omega(V) = E_K - E_S = \Delta_0 + \hbar^2 k^2/2m + (\delta m_s)V^2/2 \quad (37)$$

з енергіями основного солітонного стану E_s і збуджених станів E_k гамільтоніану (8), а \vec{D}_k - ефективний дипольний момент переходу у збуджені стани. У випадку солітонного стану надлишкового електрона цей дипольний момент легко вираховується, а для дипольно активного збудження (екситон чи амідне коливання) він визначається так званим оптичним ангармонізмом, який відповідає за появу у спектрах поглинання обертонів - ліній на подвійних частотах відповідного збудження.

Функція $F_k(\omega)$ має резонанс на частоті

$$\hbar\omega_k = E_k - E_s + W = 3\Delta_0 + \hbar^2 k^2 / 2m + (\delta m_s) V^2 / 2, \quad (38)$$

де W - енергія деформації ланцюга, а Δ_0 - енергія, що відокремлює зв'язаний солітонний рівень від делокалізованих станів квазічастинки. Зауважимо, що поява енергії деформації у виразу (38) є наслідком принципу Франка-Кондона. Таким чином, ідентифікація у спектрах поглинання ліній, пов'язаних з фотодисоціацією солітонів, може стати експериментальним інструментом їх реєстрації.

В дисертації також проведені розрахунки диференціального перерізу комбінаційного розсіяння світла молекулярним ланцюгом при наявності в ньому солітонного збудження. Процес розсіяння фотону на молекулярній системі описується в другому порядку теорії збурень по оператору взаємодії з полем і проходить через проміжні збуджені електронні стани молекул. Тому у повному гамільтоніані були враховані ще електронні збудження, з якими може взаємодіяти квазічастинка. Розрахунки ймовірності розсіяння фотона показали, що вона буде пропорційною функції (33), в якій замість частоти ω фігурує різниця частот падаючого та розсіяного світла, $\omega \rightarrow \omega_a - \omega_a'$, а частота $\omega(V)$ визначеною виразом (37). Таким чином, в околиці

частоти падаючого світла ω_0 ймовірність розсіяння як функція частоти розсіянного світла ω_0 , буде мати різкий пік при резонансній частоті (38) і в спектрах комбінаційного розсіяння світла може реєструватись енергія фотодисоціації солітона.

Згідно з гіпотезою О.С. Давидова [4], формування стабільних солітонів в альфа-спіральных білкових молекулах забезпечує високу ефективність транспорту енергії гідроліза молекул АТФ в процесах життєдіяльності різноманітних організмів. Носієм енергії виступає коливання амід I, яке в наслідок автолокалізації утворює солітон. Амідні коливання мають досить помітний оптичний ангармонізм. В інфрачервоних спектрах біологічних макромолекул добре спостерігаються достатньо інтенсивні амідні обертони [5]. Тому для давидовських солітонів дипольний момент D_k в (36) буде відмінний від нуля і в полі зовнішньої електромагнітної хвилі вони будуть з деякою ймовірністю дисоціювати. В живих організмах одночасно і узгоджено працюють багато органів і систем, між якими відбувається обмін енергією, що має і узгоджуючий інформативний характер. Навіть невеликі завади, що вносяться у цю складну сітку зв'язків, можуть суттєвим чином впливати на роботу усього організму. Отож, якщо давидовські солітони дійсно відіграють важливу роль в біологічних процесах, то електромагнітні коливання з частотою фотодисоціації солітонів $\omega_r = \omega_{k=0} = 3\Delta_0 = \chi^4/Jw^2$ можуть впливати на біологічні об'єкти. Для альфа-спіральных білкових молекул загальноприйняті [6] наступні параметри

$J = 1.55 \cdot 10^{-22}$ Дж, $w = 19.5$ Н/м, $\chi = (3.4 - 4) \cdot 10^{-11}$ Н, що дає для резонансної частоти $\omega_r/2\pi$ значення 34 - 65 ГГц, а для відповідної довжини хвилі значення 4.6 - 8.8 мм.

Дійсно, вплив електромагнітних коливань цього діапазону на біологічні об'єкти різного ступеня організації, від найпростіших (клітини) до найскладніших (людський організм), спостерігається багатьма дослідниками [7]. Однією із суттєвих рис цієї нетеплової дії електромагнітних коливань на живі організми є її різко резонансний характер. Поки що немає загальноприйнятого пояснення біологічної дії електромагнітних хвиль цього діапазону. Але, якщо гіпотеза Давидова вірна, то дисоціація солітонів уявляється одним із можливих механізмів цієї дії.

В четвертій главі у рамках адиабатичного наближення досліджуються колективні самоузгоджені стани багатоелектронної системи і деформації ланцюга. В основному глава присвячена дослідженню станів електронів провідності в одновимірному провіднику із скінченною концентрацією носіїв, $n_e = N_e/N$, де N - кількість вузлів у ланцюгу і $N \rightarrow \infty$. Але на початку розглянуто стаціонарні стани декількох надлишкових електронів у зоні провідності - два та чотири. Для багаточастинкових систем важливу роль відіграє статистика частинок. У випадку статистики Бозе усі N_e частинок збираються на єдиному енергетичному рівні безвідбивного самоузгодженого потенціалу, який вони утворюють для себе, деформуючи ґратку. Тобто, утворюється один багаточастинковий солітон. А електрони у силу статистичі Фермі можуть формувати лише двухчастинковий солітон, в якому єдиний зв'язаний стан з хвильовою функцією типу (14) займають два електрони з протилежними спінами.

Для чотирьох електронів, з урахуванням співвідношення (12), рівняння (7) зводяться до системи двох нелінійних рівнянь для хвильових функцій заселених електронами рівнів (по

два з протилежними спінами). В довгохвильовому наближенні ця система рівнянь має точний розв'язок, із якого випливає, що розподіл густини електронів у ланцюгу можна представити у вигляді

$$\rho(x) = \frac{\alpha}{ch^2[\alpha(x-R)]} + \frac{\alpha}{ch^2[\alpha(x+R)]}, \quad (39)$$

де α визначено виразом (15), а $R \rightarrow \infty$ коли довжина ланцюга прямує до нескінченості. Таким чином, згідно нульовому адиабатичному наближенню, чотири надлишкових електрони формують у м'якому ланцюгу два бісолітони, які внаслідок Фермі-відштовхування розташовуються на максимальній відстані між ними, обмеженою довжиною ланцюга.

Далі в дисертації досліджується багатоелектронна система в простому ланцюжку при скінченій температурі. Стан термодинамічної рівноваги відповідає мінімуму вільної енергії, для якої, згідно з відомою нерівністю, можна записати

$$F < \langle H - \mu N_e - VP \rangle_0 - TS_0, \quad (40)$$

де усереднення правдється з матрицею густини, що відповідає гамільтоніану (8) нульового адиабатичного наближення, S_0 - ентропія в цьому ж наближенні, T - температура, а V і μ - множники Лагранжа, які враховують, що стан термодинамічної рівноваги шукається при певних значеннях повного імпульсу системи $P = \langle P \rangle$ та кількості електронів $N_e = \langle N_e \rangle$.

Коефіцієнти β_q , які входять в хвильові функції (13) та гамільтоніан (8) адиабатичного наближення і визначають деформацію ґратки, знаходяться із умови мінімуму термодинамічного функціоналу (40). З цієї умови витікає співвідношення (12), в якому однак замість чисел заповнення n_{s_j} j -того рівня електронем із спіном s фігурують їх середні термодинаміч-

ні значення. Таким чином, з врахуванням цього співвідношення, рівняння (7) стають системою нелінійних рівнянь для усіх власних функцій Ψ_j . В довгохвильовому наближенні ця система, як і в випадках однієї та декількох частинок, має точний аналітичний розв'язок, який можна записати у блохівському вигляді за допомогою еліптичних функцій

$$\Psi_j(x) = \psi_p(x) = u_p(x) \exp\{-[\zeta(p) - (\eta_1/\omega_1)p]x\}, \quad (41a)$$

де

$$u_p(x) = C_p \exp(-\eta_3 p) \frac{\delta(x + \omega_3 + p)}{\delta(p) \delta(x + \omega_3)} \exp[-(\eta_1/\omega_1)px]. \quad (41b)$$

Тут $\delta(z)$ і $\zeta(z)$ - сигма- та дзета- функції Вейерштрасса, ω_j і η_j - стандартні константи теорії еліптичних функцій [8], C_p - нормуючий множник, а p - параметр розв'язку, який може приймати значення

$$p = p_n(\alpha) = i\alpha + \omega_1 n. \quad (42)$$

де $n = 0$ або 1 , а α - дійсна змінна. При цьому електрони, деформуючи ґратку, утворюють самоузгоджений однозонний періодичний потенціал, в енергетичному спектрі якого присутня єдина щилина

$$2\Delta = \frac{\hbar^2}{2m} (e_2 - e_3) \quad (43)$$

заборонених енергій, що відокремлює верхню зону дозволених енергій ($n = 0$ в формулі (42)) від нижньої зони ($n = 1$ в (42)), яка має ширину

$$D = \frac{\hbar^2}{2m} (e_1 - e_2). \quad (44)$$

У виразах (43) та (44) фігурують стандартні константи теорії еліптичних функцій [8] $e_j = \wp(\omega_j)$, $j = 1, 2, 3$.

Параметри самоузгодженого стану - напівперіоди ω_1, ω_3

та хімічний потенціал електронів μ - знаходяться із трьох умов самоузгодження

$$\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\bar{n}_{\mathbf{snk}}}{(\eta/\omega) + \zeta(p_n)} = \frac{1}{\mathfrak{z}}$$

$$\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \bar{n}_{\mathbf{snk}} = \frac{2k_F}{\pi} \quad (45)$$

$$\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\bar{n}_{\mathbf{snk}} \zeta'(p_n)}{(\eta/\omega) + \zeta(p_n)} = 0$$

Тут $k_F = \pi n_e / 2a$ - хвильовий вектор Фермі для одновимірного випадку, \mathfrak{z} співпадає з параметром локалізації бісолітона (16), а $\zeta(z)$ - еліптична функція Вейерштрасса.

Самоузгоджена періодична деформація ґратки супроводжується періодичною модуляцією розподілу густини електронів у ланцюгу, яка при відмінному від нуля значенні повного імпульса P буде рухатись по ланцюгу з певною швидкістю V

$$\rho_1(x - Vt) = \frac{n_e}{a} - \frac{1}{\mathfrak{z}} \left(\frac{\eta_1}{\omega_1} + \zeta(x - Vt + \omega_3) \right) \quad (46)$$

При температурі абсолютного нуля із умов (45) витікає, що хімпотенціал розташований в середині забороненої зони, а напівперіоди приймають значення

$$\omega_1(T=0) = \omega_0 = \frac{\pi}{2k_F}, \quad \omega_3(T=0) = 1 \tilde{\omega}_0 = 1 \frac{\pi}{2\mathfrak{z}} \quad (47)$$

Перше з цих рівнянь є співвідношенням Пайерлса, а друге було одержане Білоколосом [9].

Таким чином, самоузгоджений багатоелектронний стан в одновимірному провіднику являє собою рухливу хвилю зарядової густини (ХЗГ) (див., наприклад, [10]).

Властивості ХЗГ - її форма, енергетичні величини (43) і

(44) та температурна поведінка конденсату ХЗГ - суттєво залежать від величини безрозмірного параметра

$$\tau = \frac{k_F}{\alpha} = \frac{\pi \hbar^2 \omega_p (1-s^2)}{8m\chi^2 a^2} \quad (48)$$

При малому значенні цього параметра, $\tau < 1$, із (46) витікає, що ХЗГ являє собою ґратку достатньо відокремлених бісолітонів. При цьому ширина конденсатної зони (44) значно менше щилини (43), яка буде співпадати з енергією відщеплення бісолітонного рівня від зони провідності. В протилежному випадку, коли $\tau > 1$, ХЗГ можна апроксимувати гармонійною хвилею. При цьому щилина в електронному спектрі (43) буде значно менша за ширину заповненої зони (44), яка відповідає в цьому випадку енергії Фермі. Тобто, нерівність $\tau > 1$ відповідає наближенню Фрьоліха, яке широко застосовується при трактовці експериментальних спостережень. Не зважаючи на значний прогрес, ряд експериментальних фактів не знаходив свого задовільного пояснення в рамках цього наближення. До таких фактів, наприклад, відноситься наявність у спектрах осциляцій струму ХЗГ високих гармонік з дуже великою довжиною когерентності [10].

За допомогою розкладу по гармонійним функціям виразу (46) одержуємо для гармонійного аналізу струму $j_{CDW}(t) = eV\rho_1(x_0, t)$, обумовленого рухом ХЗГ, вираз

$$j_{CDW}(t) = \langle j_{CDW} \rangle + 2 \sum_{n=1}^{\infty} C_n \cos(2\pi n \nu t - \alpha_n) \quad (49)$$

Як бачимо, на середній струм $\langle j_{CDW} \rangle = e n_e V/a$ накладаються його осциляції з фундаментальною частотою

$$\nu = \frac{k_F V}{\pi} = \frac{k_F a}{\pi n_e} \langle j_{CDW} \rangle = \frac{1}{2e} \langle j_{CDW} \rangle \quad (50)$$

що пропорційна середньому струму з коефіцієнтом пропорційності $(1/2e)$, та з її гармоніками $v_n = vn$, амплітуда яких спадає з ростом n

$$C_n = \frac{4\pi \langle j_{CDW} \rangle k_F n}{\pi \operatorname{sh}(\pi k_F n / \alpha)} \quad (51)$$

Звичайно спостерігається різкий пік на фундаментальній частоті (50) та декілька (іноді до 20) піків вищих гармонік із спадаючою амплітудою. Ці надзвичайно вузькі частотні піки спочатку вважались шумом, обумовленим наявністю домішок і інших дефектів. Але ж при цьому довжина когерентності осциляцій повинна бути близька до постійної ґратки, що суперечить експериментальним даним, які свідчать, що вона співмірна з розміром зразка [10]. Таким чином, експериментальні дослідження осциляцій струму ХЗГ підтверджують її суттєво нелінійний характер.

При температурі відмінній від нуля розв'язок рівнянь (45) стає більш складним і аналітично температурну поведінку стану ХЗГ можна проаналізувати лише в граничних випадках. Так, при великому значенні параметра (48), $\tau > 1$ (граничний випадок фьрোলіхівського наближення), із умов (45) випливає, що період ХЗГ не залежить від температури, хімпотенціал співпадає з енергією Фермі, а температурна залежність щилини (43) визначається формулою БКШ теорії надпровідності. При цьому природньо, що температура фазового переходу Пайерлса T_p зв'язана з енергетичною щилиною $2\Delta_0$ при нульовій температурі співвідношенням БКШ: $\Delta_0 = 1.76 k_B T_p$.

В граничному ж бісолітонному випадку, коли $\tau < 1$, період ХЗГ стає функцією температури і при малих температурах зменшується з ростом температури. При цьому формула БКШ для

температурної залежності щилини $\Delta(T)$ перестає бути вірною, а співвідношення між критичною температурою та напівшириною при нульовій температурі набуває вигляду

$$\Delta_0 = \frac{\pi}{3.2 \tau} k_B T_p \quad (52)$$

Для довільного ж значення параметра (48) проведено чисельний аналіз умов (45) при температурі фазового переходу. Результати розрахунків представлені на мал. 2, де показано залежність від параметра τ відношення напівширини щилини при нульовій температурі до температури фазового переходу - $\Delta_0/k_B T_p$ та відношення періоду ХЗГ при критичній температурі до її періоду при нульовій температурі - $\omega(T_p)/\omega_0$. Як бачимо, співвідношення БКШ між щилиною і критичною температурою порушується при $\tau < 1.2$, а помітну температурну залежність періоду ХЗГ можна очікувати при $\tau < 0.8$.

Фрьоліхівська рухома хвиля зарядової густини спостерігається у таких квазіодновимірних сполуках, як $NbSe_3$, TaS_3 , $(TaSe_4)_2I$ і $K_{0.3}MoO_3$ [10]. В більшості цих матеріалів, за винятком $K_{0.3}MoO_3$, період ХЗГ не залежить від температури. В той же час експериментально виміряне співвідношення $\Delta_0/k_B T_p$ перевищує співвідношення БКШ, хоча температурна залежність щилини $2\Delta(T)$ якісно близька до формули БКШ. Це може свідчати про те, що в цих матеріалах найімовірніше реалізуються значення параметра τ порядку або більші одиниці. Розглянуті ж в дисертації особливості температурної поведінки стану ХЗГ при $\tau < 1$ будуть спостерігатись в матеріалах з більш низькою концентрацією носіїв в ланцюгах.

ОСНОВНІ ПОЛОЖЕННЯ, ЯКІ ВИНОСЯТЬСЯ

НА ЗАХИСТ

1. Формулювання в представленні вторинного квантування адиабатичного наближення в задачі про електрон- або екситон-фононну взаємодію.

2. Варіаційне дослідження основного стану квазічастинки, що взаємодіє з фононами в молекулярному ланцюгу, при довільній силі зв'язку.

3. Теорія солітонних станів в молекулярному ланцюгу з врахуванням реальної дисперсії енергії квазічастинки в зоні.

4. Теорія солітонних станів в альфа-спіральних білкових молекулах.

5. Теорія самоузгоджених станів носіїв в лінійному бінарному ланцюгу.

6. Теорія збурень для солітонів в молекулярних ланцюгах.

7. Ефект гальмування солітона при його русі в полі зовнішнього періодичного потенціалу.

8. Прискорення солітона зовнішньою звуковою хвилею.

9. Гальмування солітонів при наявності дисипації в фононній підсистемі

10. Кореляція руху солітонів в паралельних молекулярних ланцюгах.

11. Спектр люмінесценції та радіаційний час життя екситонних солітонів в одновимірних молекулярних системах.

12. Дисоціація молекулярних солітонів у полі зовнішньої електромагнітної хвилі.

13. Прояв солітонних станів у спектрах комбінаційного розсіяння світла.

14. Гіпотеза про можливий механізм біологічної дії електромагнітних коливань міліметрового діапазону.

15. Теорія хвиль зарядової густини в одновимірних провідниках на основі точного розв'язку системи нелінійних самоузгоджених рівнянь.

16. Інтерпретація спектру осциляцій струму, обумовленого рухом хвилі зарядової густини в квазіодновимірних матеріалах.

17. Одержані в наближенні середнього поля:

- 1) температурна залежність періоду хвилі зарядової густини;
- 2) відхилення співвідношення між шириною в електронному спектрі при нульовій температурі і температурою фазового переходу Пайерлса від співвідношення БКШ.

ОСНОВНІ ПУБЛІКАЦІЇ ЗА ЗМІСТОМ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Еремко А.А. Радиационное время жизни самолокализованного экситона в молекулярной цепи. - В кн: Спектроскопия молекул и кристаллов. Киев: Наукова думка, 1978, с. 11-17.
2. Еремко А.А., Сергиенко А.И. Солитоны в одномерных молекулярных структурах. - В кн.: Современные проблемы физики твердого тела и биофизики. Киев: Наукова думка, 1982, с. 49 - 60.
3. Eremko A.A. Photodissociation of Davydov solitons. - In book: Nonlinear and turbulent processes in physics. New York: Harwood Acad. Publ., 1984, p. 757 - 761.
- Еремко А.А. Фотодиссоциация давидовских солитонов. - В кн: Проблемы нелинейных и турбулентных процессов в физике. Киев: Наукова думка, 1985, с. 180 - 184.
4. Eremko A.A. Dissociation of Davydov solitons by

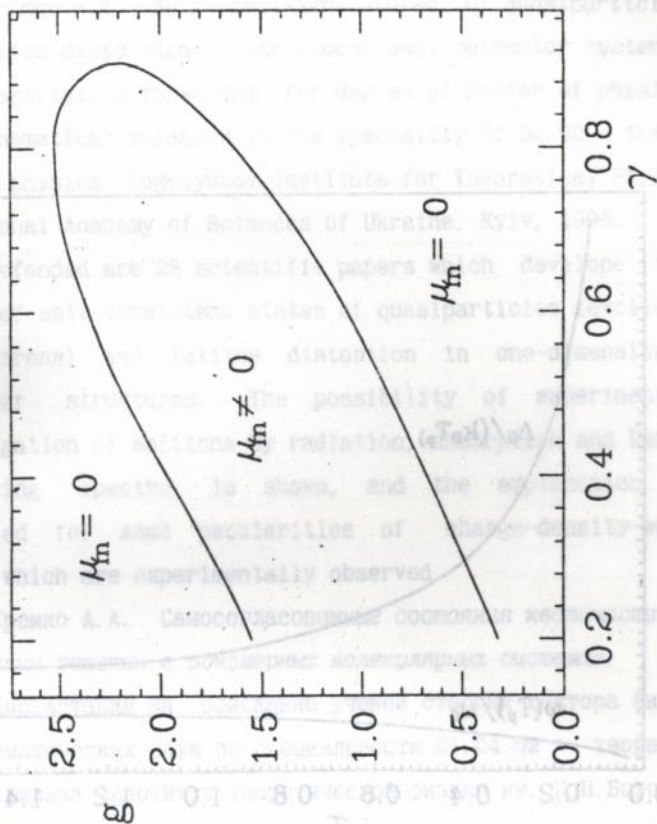
- electromagnetic wave. - In book: Davydov's Soliton Revisited. P. L. Christiansen and A. C. Scott eds., New York: Plenum Press, 1990, p. 429 - 438.
5. Eremko A.A. The Frohlich charge-density wave as a lattice of Davydov's solitons.-In: Future directions of nonlinear dynamics in physical and biological systems. New York: Plenum Publ., 1993, p. 461 - 464.
 6. Давыдов А.С., Еремко А.А. Радиационное время жизни солитонов в молекулярных цепях. - УФЖ, 1977, т. 22, N 6, с. 881 - 893.
 7. Давыдов А.С., Еремко А.А., Сергиенко А.И. Солитоны в альфа-спиральных белковых молекулах. - УФЖ, 1978, т. 23, N 6, с. 983 - 993.
 8. Еремко А.А., Сергиенко А.И. Солитонные возбуждения альфа - спиральных белковых молекул. - УФЖ, 1980, т. 25, N 12, с. 2013 - 2020.
 9. Давыдов А.С., Еремко А.А. Торможение солитонов в молекулярных цепях. - ТМФ, 1980, т.43, N 3, с. 367 - 377.
 10. Еремко А.А., Сергиенко А.И. К теории солитонов в молекулярных цепях. - ФТТ, 1982, т. 24, N 12, с. 3720 - 3722.
 11. Еремко А.А., Сергиенко А.И. Экситонные и солитонные возбуждения в молекулярных цепях. - УФЖ, 1983, т.28, N 3, с. 338 - 342.
 12. Еремко А.А. Диссоциация давидовских солитонов в поле электромагнитной волны. - ДАН УССР, серия А, 1984, N3, с. 52 - 55.
 13. Eremko A.A., Gaididei Yu.B., Vakhnenko A.A. Dissociation-accompanied Raman scattering by Davydov solitons. - Phys. Stat. Sol. (b), 1985, V. 127, No 3,

p. 703 - 713.

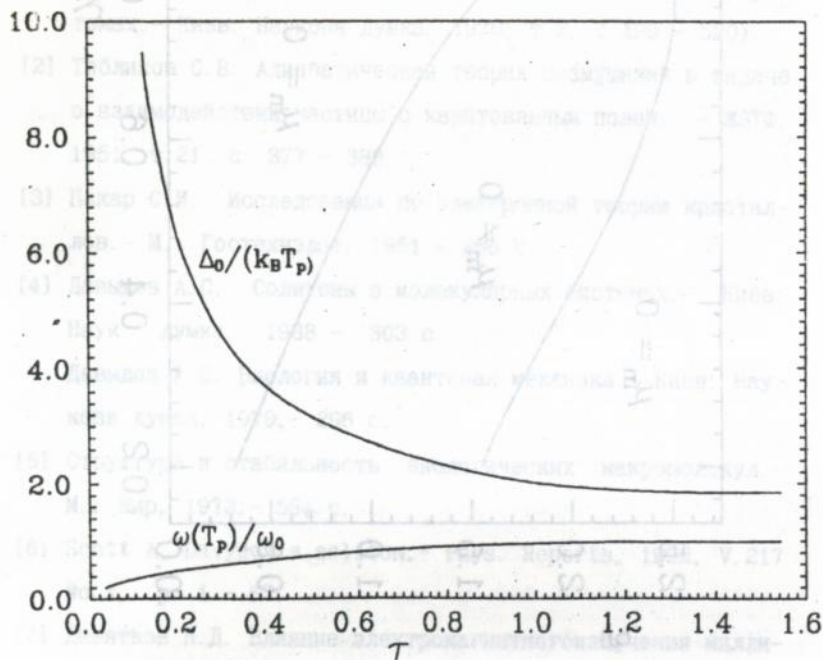
14. Вахненко А.А., Еремко А.А. Движение давидовского солитона в периодическом потенциале. - ЖТФ, 1989, т.59, вып. 5, с. 1 - 5.
15. Brizhik L.S., Eremko A.A. Soliton states in a chain with two atoms per elementary cell. - Phys. Stat. Sol. (b), 1991, V. 164, No 3, 525 - 536.
16. Eremko A.A. Peterls - Frohlich problem in continuum approximation. - Phys. Rev. B, 1992, V. 46, No 7, p. 3721 - 3728.
17. Eremko A.A. Mean-field solution of the continuum Frohlich problem at finite temperature. - Phys. Rev. B, 1994, V. 50, No 8, p. 5160 - 5170.
18. Brizhik L.S., Eremko A.A. Electron autolocalized states in molecular chains. - Physica D, 1995, V. 81, No 3, p. 295 - 304.
19. Brizhik L.S., Eremko A.A., La Magna A. The ground state of an electron or exciton in the Holstein model. - Phys. Lett. A, 1995, V. 200, p. 213 - 218.
20. Brizhik L.S., Eremko A.A., la Magna A., Pucci R. The ground state of an extra electron interacting with acoustic phonons in a molecular chain. - Phys. Lett. A, 1995, V. 205, p. 90 - 96.

ЦИТОВАНА ЛИТЕРАТУРА

- [1] Боголюбов Н.Н. Об одной новой форме адиабатической теории возмущений в задаче о взаимодействии частицы с квантовым полем. - Укр. мат. журн., 1950, т.2, N 2, с.3-24. (см. также Боголюбов Н.Н. Избранные труды в трех томах. - Киев: Наукова думка, 1970; т.2, с.499 - 520).
- [2] Тябликов С.В. Адиабатическая теория возмущений в задаче о взаимодействии частицы с квантованным полем. - ЖЭТФ, 1951, т.21, с. 377 - 388.
- [3] Пекар С.И. Исследования по электронной теории кристаллов. - М.: Гостехиздат, 1951. - 256 с.
- [4] Давыдов А.С. Солитоны в молекулярных системах. - Киев: Наук. думка, 1988. - 303 с.
Давыдов А.С. Биология и квантовая механика. - Киев: Наукова думка, 1979. - 296 с.
- [5] Структура и стабильность биологических макромолекул. - М.: Мир, 1973. - 584 с.
- [6] Scott A. Davydov's soliton. - Phys. Reports, 1992, V.217 No 1, p. 1 - 67.
- [7] Девятков Н.Д. Влияние электромагнитного излучения миллиметрового диапазона длин волн на биологические объекты. - УФН, 1973, т. 110, N 3, с. 453 - 454.
- [8] Ахиезер Н.И. Элементы теории эллиптических функций. - М.: Наука, 1970. - 303 с.
- [9] Белоколот Е.Д. Задача Пайерлса-Фрелиха и конечнзонные потенциалы. I. - ТМФ, 1980, т. 45, N 2, с. 268 - 275.
- [10] Gruner G. Current oscillations and interference effects in driven charge density wave condensates. - Prog. Low Temp. Phys., 1989, V. 12, p. 195 - 269.



Мал.І. Діаграма станів квазічастинки, що взаємодіє з акустичними фононами, в залежності від значень константи взаємодії g_a та параметра неадіабатичності γ_a .



Мал.2. Залежність від параметра τ відношень напівширини щилини в електроннім спектрі при нульовій температурі до температури фазового переходу Лайерлса T_P , $\Delta_0/k_B T_P$, та періода ХЗГ при критичній температурі до її періоду при $T = 0$, $\omega(T_P)/\omega_0$.

Eremko A.A. *Self-consistent states of quasiparticles and lattice distortion in one-dimensional molecular systems.*

Dissertation forwarded for degree of doctor of physics and mathematical sciences in the speciality 01.04.02 - theoretical physics. Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 1996.

Defended are 28 scientific papers which develop the theory of self-consistent states of quasiparticles (excitons or electrons) and lattice distortion in one-dimensional molecular structures. The possibility of experimental investigation of solitons by radiation, absorption and Raman scattering spectra is shown, and the explanation is suggested for some peculiarities of charge-density-wave states which are experimentally observed.

Еремко А.А. *Самосогласованные состояния квазичастиц и деформации решетки в одномерных молекулярных системах.*

Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02 - теоретическая физика. Институт теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова Национальной Академии Наук Украины, Киев, 1996.

Защищается 28 научных работ, которые развивают теорию самосогласованных состояний квазичастиц (экситонов или электронов) и деформации решетки в одномерных молекулярных структурах. Показана возможность экспериментального исследования солитонов по спектрам излучения, поглощения и комбинационного рассеяния света и предложено объяснение ряду наблюдаемых особенностей состояния волны зарядовой плотности.

Ключові слова: квазіодновимірні сполуки, електрон/екситон-фононна взаємодія, солітони, хвиля зарядової густини.

Franko A. A. Self-consistent states of quasiparticles and lattice distortion in one-dimensional molecular systems. Dissertation forwarded for degree of doctor of physics and mathematical sciences in the specialty 01.04.02 - theoretical physics. Bogolyubov Institute for Theoretical Physics

of National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 1996. Defended are 28 scientific papers which develop the theory of self-consistent states of quasiparticles (excitons or electrons) and lattice distortion in one-dimensional molecular structures. The possibility of experimental investigation of solitons by radiation, absorption and Raman scattering spectra is shown, and the explanation is suggested for some peculiarities of charge-density-wave states which are experimentally observed.

Franko A. A. Самосогласовані стани квазічастинок та деформації ґратки в одновимірних молекулярних системах. Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук по спеціальності 01.04.02 - теоретична фізика. Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної академії наук України, Київ, 1996.

Забезпечено 28 наукових праць, котрі розвивають теорію самосогласованих станів квазічастинок (екситонів чи електронів) та деформації ґратки в одновимірних молекулярних системах.

Єремко Олександр Олександрович
Самоузгоджені стани квазічастинок та деформації ґратки в одновимірних молекулярних системах

Зам. - 93 Формат 60×90/16 Обл.-вид. арк. - 2
Підписано до друку 01.10.1996 р. Тираж 100 прим.

Поліграфічна дільниця ІТФ ім. М. М. Боголюбова НАН України

441022

A

AB 35.925