

СОЛИТОНЫ ПОЛЯРИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОНА В СПИРАЛЬНОЙ МОЛЕКУЛЕ

*А. А. Заболотский**

*Институт автоматики и электрометрии Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 13 июня 2018 г.,
после переработки 23 июля 2018 г.
Принята к публикации 27 июля 2018 г.

Изучается эволюция спина электрона, движущегося по оси длинной спиральной молекулы, под действием внешнего поля. Поле создается диполями отдельных молекул, образующих сложную молекулярную структуру, например, молекулу ДНК. Динамика поляризации электрона, вызванная спин-орбитальным взаимодействием, описывается в рамках интегрируемого обобщения уравнений Манакова. В гамильтониане модели учитывается фазовая кросс-модуляция, самомодуляция и аналоги гамильтонианов Рашбы и Дрессельхауса. Соответствующий аппарат, основанный на решении задачи Римана – Гильберта, применен для нахождения солитонных решений. Полученные одно- и двухсолитонные решения демонстрируют ряд новых свойств. Показано, что локальное возмущение вызывает селективное влияние на поляризацию солитона и может быть использовано для управления положением спина электрона с помощью примесных молекул или квантовых точек с постоянным дипольным моментом. Обнаружено, что спин-орбитальное взаимодействие приводит к сильной пространственной модуляции формы солитонов. При столкновении солитонов наблюдается перенос модуляции между солитонами и изменение ее амплитуды.

DOI: 10.1134/S0044451019010140

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение солитонов в органических спиральных молекулах играет фундаментальную роль для описания денатурализации ДНК с помощью так называемой модели Пейарда – Бишопа [1, 2]. Солитонный механизм переноса энергии, выделяемой из аденозинтрифосфатного белка через α -спиральные белки, представляется приоритетным [1]. Солитонные возбуждения учитываются при анализе зарядовых и энергетических транспортных свойств молекул ДНК [3–5]. Во всех этих сценариях предполагается, что органические молекулы достаточно деформируемы и, следовательно, взаимодействие квазичастиц (электронов или экситонов) и колебаний решетки существенны. Более того, взаимодействие определяет существование устойчивых солитонов, когерентно распространяющихся вдоль молекулы.

В последнее десятилетие во многих экспериментах показано существование хиральной спин-селективности в органических спиральных молекулах

[6–14]. Этот эффект обусловлен спин-орбитальной связью (СОС) между электронным импульсом и молекулярным электрическим полем, создаваемым спиральным расположением молекулярных диполей. СОС хорошо известна из работ по физике полупроводников. Два фундаментальных типа СОС описываются гамильтонианами Дрессельхауса [15] и Бычкова – Рашбы [16]. Пример реализации СОС показан в работе [17]. Предложено много теоретических моделей для объяснения экспериментальных данных, в том числе и для органических молекул [18–27]. Однако эти модели не приводят к достаточно хорошему количественному согласию с экспериментальными данными. Недавно была отмечена важная роль влияния электрон-решеточного взаимодействия на перенос спина в органических спиральных молекулах [26]. Это указывает на необходимость дополнения линейной квантовой теории нелинейными процессами [24].

Нелинейное уравнение Шредингера (НУШ) широко используется как универсальная математическая модель для описания эволюции медленно меняющегося волнового пакета в нелинейной среде и имеет множество применений. Метод обратной за-

* E-mail: zabolotskii@iae.nsk.su

дачи рассеяния (МОЗР) был впервые разработан и применен к НУШ Захаровым и Шабатом [28, 29]. В определенных физических ситуациях одновременно появляются два или более волновых пакета с различными несущими частотами. Их взаимодействие описывается связанными НУШ. Если связь происходит только через межфазную модуляцию, чей коэффициент равен коэффициенту фазовой самомодуляции, то эта система, получившая название системы Манакова, является интегрируемой. Соответствующий аппарат МОЗР развит Манаковым [30]. Интерес к этой системе обусловлен широким спектром ее приложений в разных областях физики. Многосолитонные решения системы Манакова, демонстрирующие вращение поляризации вследствие столкновений, получены разными методами (см., например, работы [30–32]). Найдены также некоторые интегрируемые обобщения этих уравнений [33–35]. Уравнения Манакова заслуживают дальнейших подробных исследований, поскольку важны для решения различных физических задач, в том числе с учетом СОС. Задача Римана–Гильберта (РГ) широко используется для решения различных интегрируемых уравнений [29], которые имеют приложения в различных частях физики: теории конденсата Бозе–Энштейна, нелинейной оптики и многих других (см., например, [33–39]).

В настоящей работе изучаются новые специфические нелинейные поляризационные эффекты, определяемые спин-орбитальным взаимодействием электрона с полем диполей длинной спиральной молекулы или с локальным, зависящим от координаты дипольным полем. Для этого получено интегрируемое обобщение системы уравнений, приведенной в работах [24, 40], которая выведена для описания эволюции поляризации спина электрона при прохождении сквозь спиральную молекулу.

2. ВЫВОД СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ МОДЕЛИ

2.1. Динамика спина электрона в спиральной молекуле

Суммарный дипольный момент пептидов, составляющих α -спиральные белки и другие макромолекулы, ориентирован вдоль оси молекулы [41]. Как и в работах [24, 40, 42], рассматриваем схему, в которой «внешний» электрон инжектируется в торец молекулы и движется вдоль ее центральной оси (ось z на рис. 1). Молекула имеет спиральную струк-

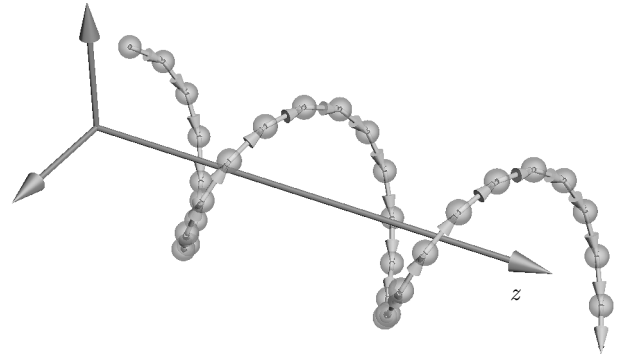


Рис. 1. Спиральная молекула. Электрон движется по оси z . Показаны дипольные моменты, направленные по тангенциальным векторам

туру с геометрическими параметрами, не зависящими от переменных. В работах [24, 40, 42] использовалась упрощенная схема расположения диполей вдоль оси молекулы, т. е. вдоль оси z . По-видимому, направление дипольных моментов от атомов углерода к атому азота в молекуле ДНК, т. е. по спиральной кривой, является более реалистичным [41], чем использованное в работах [24, 40]. Поэтому в настоящей работе рассматриваем движение электрона сквозь винтовое расположение пептидных диполей, направленных вдоль тангенциальной составляющей пептидной спирали. Пусть диполи \mathbf{d}_j расположены в точках $\gamma_j = \{a \cos(ks_j), a \sin(ks_j), \tau s_j\}$, где a — радиус спирали, τ — ее шаг, $s_j = j\delta$, δ — расстояние между диполями на спирали, а их векторы направлены вдоль производной $\lim_{\delta \rightarrow 0} (\gamma_{j+1} - \gamma_j)/\delta$, т. е.

$$\mathbf{d}_j = \frac{d}{\sqrt{a^2 k^2 + \tau^2}} \{-ak \sin(ks_j), ak \cos(ks_j), \tau\},$$

см. рис. 1. Типичное число диполей за один оборот вокруг оси в ДНК $N_d = 10$, $a = 0.7$ нм и $b = 2\pi/k = N_d \delta = 3.2$ нм. Таким образом, общее электрическое поле на оси $\mathbf{r} = (0, 0, z)$ спиральной молекулы, создаваемое диполями составляющих ее молекул, имеет вид

$$\mathbf{E}(z) = \sum_n \frac{3((\mathbf{r} - \gamma_n) \cdot \mathbf{d}_n)(\mathbf{r} - \gamma_n) - \mathbf{d}_n}{4\pi\epsilon_0 [a^2 + (z - n\delta)^2]^{3/2}}. \quad (1)$$

Для большого числа молекул во всей спирали ($N_m > 100$) поле внутри нее на оси z можно считать постоянным. Сделаем предельный переход к непрерывной переменной $\sum_n \rightarrow b/\delta \int du$, $(n\delta - z)/b \rightarrow u$. Отсюда и из (1) получаем

$$E_x + iE_y = \frac{e^{ikz}}{4\pi\epsilon_0\delta b^3} \times \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{3ue^{ikbu}}{\left(\frac{a^2}{b^2} + u^2\right)^{5/2}} - \frac{iakbe^{ikbu}}{\left(\frac{a^2}{b^2} + u^2\right)^{3/2}} \right] du = \quad (2)$$

$$= \frac{ik^2 e^{ikz}}{\pi\epsilon_0\delta b^2} K_1\left(\frac{b^2 k}{a}\right) (a - b). \quad (3)$$

Здесь K_1 — модифицированная функция Бесселя второго рода.

В то же время для короткой спирали ($N_m \approx 10$) поле сильно неоднородно. Поэтому дополнительно считаем, что амплитуда поля $E_{\perp} = -i(E_x + iE_y)$ может локально зависеть от z . Эрмитовость гамильтониана СОС обусловлена его симметризованной классической формой $\boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{E})$, где вектор $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ с компонентами — матрицами Паули. Для $\hat{\mathbf{p}} = \hat{p}_z \hat{\mathbf{e}}_z = \partial_z \hat{\mathbf{e}}_z$ гамильтониан СОС упрощается до вида

$$\hat{H}_{SOC} = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi} (\partial_s F - i\partial_s \phi F + 2F\partial_s) \\ e^{i\phi} (\partial_s F + i\partial_s \phi F + 2F\partial_s) & 0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Следуя теории Давыдова [1], для описания электрон-решеточного взаимодействия добавим нелинейную часть к гамильтониану (5). В итоге получаем двухкомпонентное НУШ, описывающее динамику спиорного состояния $\boldsymbol{\chi}(s, t) = [\chi_{\uparrow}(s, t), \chi_{\downarrow}(s, t)]^T$ с нелинейной частью, связанной с самодействием из-за деформации решетки:

$$i\partial_t \hat{\boldsymbol{\chi}}(s, t) = \hat{H} \hat{\boldsymbol{\chi}}(s, t) - 2\varepsilon [\boldsymbol{\chi}^{\dagger}(s, t) \cdot \boldsymbol{\chi}(s, t) + \varkappa^2 F(s)^2] \boldsymbol{\chi}(s, t). \quad (7)$$

Здесь $t = E_b \tilde{t} / \hbar$ — безразмерное время, \tilde{t} — физическое время, знаки $\varepsilon = +, -$ перед нелинейной частью отвечают соответственно фокусирующей и дефокусирующей средам. В уравнение (7) добавлен потенциал $\varkappa^2 F^2$, $\varkappa \in \mathbb{R}$, создаваемый внешним полем с нормированной амплитудой F .

Перейдем к новым функциям

$$(\chi_{\uparrow}, \chi_{\downarrow})^T = \varkappa \left(p(s, t) e^{-i\psi_1(s) - i\psi_2(t)}, q(s, t) e^{i\psi_1(s) - i\psi_2(t)} \right)^T, \quad (8)$$

где

$$2\psi_1(s) = \phi(s), \quad \partial_t \psi_2(t) = \partial_s (\psi_1(s))^2. \quad (9)$$

$$\hat{H}_{SOC} = \frac{q_0}{2} \left[\hat{p}_z \begin{pmatrix} 0 & E_{\perp}(z) \\ E_{\perp}^*(z) & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & E_{\perp}(z) \\ E_{\perp}^*(z) & 0 \end{pmatrix} \hat{p}_z \right], \quad (4)$$

где $q_0 = e\hbar/(2mc)^2$.

Перенормируем линейную часть гамильтониана электрона

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \hat{H}_{SOC} = E_b \hat{H},$$

где

$$\hat{H} = -\partial_s^2 - \gamma_{SOC} \hat{H}_{SOC}. \quad (5)$$

Здесь $E_b = \hbar^2/2mb^2$, $s = z/b$, $\partial_s = \partial/\partial s$, безразмерный спин-орбитальный параметр $\gamma_{SOC} = \hbar\lambda\mathcal{E}_0/(bE_b)$, $\mathcal{E}_0 = \max|E_{\perp}|$. Представим стационарное поле диполей в виде $\mathcal{E} = E_{\perp}/\mathcal{E}_0 = F(Z)e^{i\phi(Z)}$. Матричный оператор \hat{H}_{SOC} имеет вид

2.2. Обобщенные уравнения Манакова и их представление Лакса

Полученные в итоге из (7) и (8) уравнения в интегрируемом случае являются частным случаем следующего обобщения уравнений Манакова:

$$\begin{bmatrix} \partial_t p \\ \partial_t q \end{bmatrix} = \left[\hat{N} - 2 \begin{pmatrix} h & g \\ g & -h \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial s} - \begin{pmatrix} \partial_s h & \partial_s g \\ \partial_s g & -\partial_s h \end{pmatrix} \right] \begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix}. \quad (10)$$

Здесь $\hat{N} = i [\partial_s^2 - 2(pp_1 + qq_1 + W(s))]$, $h, g(s) \in \mathbb{R}$ и

$$p_1(s, t) = \varepsilon p^*(s, t), \quad q_1(s, t) = \varepsilon q^*(s, t). \quad (11)$$

Система уравнений (10), (11) является условием совместности следующих линейных систем:

$$\Theta_z = \mathcal{L}\Theta \equiv (i\lambda\Lambda + U)\Theta, \quad (12)$$

$$\Theta_t = (-2i\lambda^2\Lambda + V)\Theta. \quad (13)$$

Здесь Θ — 3×3 -матричная функция, λ — спектральный параметр, $\Lambda = \text{diag}(1, 1, -1)$, $U = U_0 + U_1$, $V = V_0 + V_1 - 2\lambda U_0$,

$$U_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & p \\ 0 & 0 & q \\ p_1 & q_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (14)$$

$$U_1 = i \begin{pmatrix} -h & -g & 0 \\ -g & h & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$V_0 = i \begin{pmatrix} -pp_1 & -pq_1 & \frac{\partial p}{\partial s} \\ -p_1q & -qq_1 & \frac{\partial q}{\partial s} \\ -\frac{\partial p_1}{\partial s} & -\frac{\partial q_1}{\partial s} & pp_1 + qq_1 \end{pmatrix}, \quad (15)$$

$$V_1 = - \begin{pmatrix} 0 & 0 & gq + hp \\ 0 & 0 & gp - hq \\ gq_1 + hp_1 & gp_1 - hq_1 & i(g^2 + h^2 - 2W(s)) \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Условие совместности систем (10), (11) имеет вид

$$\partial_s W(s) = g(s)\partial_s g(s) + h(s)\partial_s h(s). \quad (17)$$

Связь h и g с физическими параметрами системы уравнений (7), (8) с учетом условий (9) можно представить следующими вариантами:

$$g = -F = \text{const}, \quad h = -\partial_s \psi_1 = \text{const}, \quad (18)$$

$$g(s) = -F(s), \quad h = 0. \quad (19)$$

Применение МОЗР к системе (10), (11) для произвольных $h(s)$, $g(s)$ и даже для $g(s), h = \text{const}$ оказалось слишком громоздким, поэтому ограничимся

случаями (18) и (19). Для этих случаев в уравнениях (7) $\varkappa = 1$, $\partial_s F(s) \neq 0$ и $\varkappa = 0$, $\partial_s F(s) = 0$ соответственно.

Обозначим $w = \sqrt{h^2 + g^2}$, $w_{\pm} = \sqrt{h^2 + g^2} \pm h$. Введем новую функцию $\Psi = M\Theta$, где

$$M = \begin{pmatrix} e^{-iG(s)} & -\gamma_0 e^{iG(s)} & 0 \\ \gamma_0 e^{-iG(s)} & e^{iG(s)} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (20)$$

В результате этого преобразования спектральная проблема (12) принимает вид

$$\partial_s \Psi = L\Psi = \left(M^{-1} \mathcal{L}M - M^{-1} \frac{\partial M}{\partial s} \right) \Psi =$$

$$= \begin{pmatrix} i\lambda & 0 & \frac{e^{iG(s)}(gq + w_+p)}{\sqrt{2}w} \\ 0 & i\lambda & \frac{e^{-iG(s)}(w_+q - gp)}{\sqrt{2}w} \\ \frac{e^{-iG(s)}(gp_1 + w_-q_1)}{\sqrt{2}g} & \frac{e^{iG(s)}(gq_1 - w_-p_1)}{\sqrt{2}g} & -i\lambda \end{pmatrix} \Psi. \quad (21)$$

Здесь для случая (18) $\gamma_0 = w_-/g$, $G(s) = ws$, а в случае (19) $w_{\pm} = w = g(s)$, $\gamma_0 = 1$, $G(s) = \int_0^s g(s)$.

ходим, что для $s \rightarrow \pm\infty$ фундаментальная матрица $\Psi \rightarrow e^{(i\lambda\Lambda s)}$. Поэтому для функции

$$\Psi = \Phi e^{i\lambda\Lambda s} \quad (22)$$

3. ПРОБЛЕМА РИМАНА – ГИЛЬБЕРТА

3.1. Аналитические свойства

Сформулируем проблему РГ для систем (13), (21) в случае достаточно быстро убывающих при $s, t \rightarrow \pm\infty$ потенциалов $p, q, p_1, q_1 \rightarrow 0$. Из (21) на-

находим $\Phi \rightarrow I, s \rightarrow \pm\infty$, где I — единичная матрица. Из (13), (21) и (22) с учетом калибровочного преобразования получаем

$$\partial_s \Phi = i\lambda [\Lambda, \Phi] + \mathcal{U}\Phi, \quad (23)$$

$$\partial_t \Phi = -2i\lambda^2 [\Lambda, \Phi] + \mathcal{V}\Phi, \quad (24)$$

где $[\Lambda, \Phi] = \Lambda\Phi - \Phi\Lambda$ и

$$\mathcal{V} = M^{-1}VM, \quad \mathcal{U} = M^{-1}UM. \quad (25)$$

Из (12) и (25) следует $\text{tr}\mathcal{U} = 0$. В итоге для функций Йоста Φ_{\pm} — решений системы (23) с асимптотикой $\Phi_{\pm} \rightarrow I, s \rightarrow \pm\infty$ — находим $\det(\Phi_{\pm}) = 1, \forall s$. Решения $\Psi = \Phi_+E$ и $\Phi = \Phi_-E$ линейной системы (23) связаны матрицей рассеяния S с компонентами $s_{ij}(\lambda), i, j = 1, 2, 3$,

$$\Phi_-E = \Phi_+ES(\lambda), \quad \lambda \in \mathbb{R}, \quad (26)$$

где $E(s) = e^{i\lambda s}$ и $\det(S(\lambda)) = 1, \forall \lambda$.

Интегрируя уравнения (23) с учетом асимптотики Φ , находим уравнения Вольтерра

$$\begin{aligned} \Phi_{\mp}(\lambda, z) &= \\ &= I + \int_{\mp\infty}^z E(y-z)\mathcal{U}(y)\Phi_{\mp}(\lambda, y)E(z-y)dy. \end{aligned} \quad (27)$$

Функция Φ_{\pm} состоит из следующих столбцов: $\Phi_{\pm} = [\phi_{\pm}^{[1]}, \phi_{\pm}^{[2]}, \phi_{\pm}^{[3]}]$. Из (27) следует, что $\phi_{-}^{[3]}$ и $\phi_{+}^{[1]}, \phi_{+}^{[2]}$ допускают аналитическое продолжение в верхнюю полуплоскость $\lambda \in \mathbb{C}_+$, ($\text{Im} \lambda > 0$), а $\phi_{-}^{[1]}, \phi_{-}^{[2]}$ и $\phi_{+}^{[3]}$ — в нижнюю полуплоскость \mathbb{C}_- , ($\text{Im} \lambda < 0$). Построим функцию Йоста следующим образом:

$$\begin{aligned} J_+(\lambda) &= [\phi_{-}^{[1]}, \phi_{-}^{[2]}, \phi_{+}^{[3]}] e^{i\lambda\Lambda z} = \\ &= \Phi_+(I - P) + \Phi_-P. \end{aligned} \quad (28)$$

Здесь $P = \text{diag}(1, 1, 0)$. Из формы J_+ следует ее аналитичность при $\lambda \in \mathbb{C}_+$, а из выражения (27) — асимптотика

$$J_+(\lambda) \rightarrow I, \quad \lambda \in \mathbb{C}_+ \vee \lambda \rightarrow \infty. \quad (29)$$

Сопряженная к (23) система уравнений

$$\tilde{\Phi}_s = -i\lambda [\Lambda, \tilde{\Phi}] - \tilde{\Phi}\mathcal{U} \quad (30)$$

имеет матричное решение $\tilde{\Phi}_{\pm} = \Phi_{\pm}^{-1}$. Обозначим его строки $\tilde{\Phi} = [\tilde{\phi}^{[1]}, \tilde{\phi}^{[2]}, \tilde{\phi}^{[3]}]^T$, из которых строим функцию Йоста

$$\begin{aligned} J_- &= e^{-i\lambda\Lambda z} [\tilde{\phi}_{+}^{[1]}, \tilde{\phi}_{+}^{[2]}, \tilde{\phi}_{-}^{[3]}]^T = \\ &= (1 - P)\Phi_+^{-1} + P\Phi_-^{-1}, \end{aligned} \quad (31)$$

которая аналитична для $\lambda \in \mathbb{C}_-$ и $J_-(\lambda) \rightarrow I$ при $\lambda \in \mathbb{C}_- \vee \lambda \rightarrow \infty$. Для построенных функций Йоста проблема РГ формулируется как

$$J_+(\lambda)J_-(\lambda) = G(\lambda), \quad \lambda \in \mathbb{R}, \quad (32)$$

где

$$G(\lambda) = E \begin{pmatrix} 1 & 0 & s_{13} \\ 0 & 1 & s_{23} \\ \tilde{s}_{31} & \tilde{s}_{32} & 1 \end{pmatrix} E^{-1}, \quad (33)$$

и $\tilde{s}_{31} = s_{21}s_{32} - s_{31}s_{22}, \tilde{s}_{32} = s_{31}s_{12} - s_{11}s_{32}$.

3.2. Связь решений с потенциалом

Разложение решения J_+ спектральной проблемы (21) по степеням λ имеет вид

$$J_+(\lambda, s) = I + \frac{1}{\lambda}\Gamma(s) + \mathcal{O}(\lambda^2), \quad \lambda \rightarrow \infty. \quad (34)$$

Подставив (34) в (21), получаем для первой степени $1/\lambda$

$$\begin{aligned} L - i\lambda\Lambda &= i[\Lambda, \Gamma] = \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -2i\Gamma_{13} \\ 0 & 0 & -2i\Gamma_{23} \\ 2i\Gamma_{31} & 2i\Gamma_{32} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (35)$$

Сравнивая недиагональные компоненты матриц, получаем

$$\frac{e^{iG(s)}(gq + w_+p)}{\sqrt{2}w} = -2i\Gamma_{13}, \quad (36)$$

$$\frac{e^{-iG(s)}(qw_+ - gp)}{\sqrt{2}w} = -2i\Gamma_{23}. \quad (37)$$

3.3. Свойства симметрии

Матрица L в правой части (21) удовлетворяет условию симметрии

$$\begin{aligned} L^\dagger(\lambda^*) &= \varepsilon C^{-1}LC, \\ C &= \frac{1}{w} \begin{pmatrix} w_+ & 0 & 0 \\ 0 & w_+ & 0 \\ 0 & 0 & w \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (38)$$

где для (18) w_{\pm}, w — константы и для (19) $w_{\pm} = w = g(s)$.

Для эрмитово-сопряженной спектральной проблемы (21) с учетом свойства (38) находим

$$(\Phi_{\pm}^\dagger C)_s = i\lambda [\Lambda, \Phi_{\pm}^\dagger C] + \varepsilon\Phi_{\pm}^\dagger C\mathcal{U}^\dagger. \quad (39)$$

Таким образом, $\Phi_{\pm}^\dagger C$ — фундаментальное решение как системы уравнений (39), так и (30), т.е. $\Phi_{\pm}^\dagger C = C_0\Phi_{\pm}^{-1}$, где C_0 — постоянная матрица. В пределе

$s \rightarrow \infty$ находим $C_0 = C$. Это означает, что Φ_{\pm} обладает свойством инволюции

$$\Phi_{\pm}^{\dagger} = -\varepsilon C \Phi_{\pm}^{-1} C^{-1}. \quad (40)$$

С учетом (38) находим для функций Йоста J_{\pm} соотношение

$$J_{+}^{\dagger}(\lambda^*) = -\varepsilon C J_{-}(\lambda) C^{-1}. \quad (41)$$

Аналогично для матрицы рассеяния (26) получаем

$$S^{\dagger}(\lambda^*) = -\varepsilon C S^{-1}(\lambda) C^{-1}, \quad (42)$$

что, в свою очередь, дает связь $\tilde{\lambda}_k = \lambda_k^*$ между соответствующими нулями $\tilde{s}_{33}(\lambda)$ и $s_{33}(\lambda)$.

Используя определения J_{\pm} и матрицы рассеяния, находим

$$\det J_{+}(\lambda) = s_{33}, \quad \det J_{-}(\lambda) = \tilde{s}_{33}, \quad (43)$$

где $\tilde{s}_{33} = s_{11}s_{22} - s_{21}s_{12}$. Пусть $\{\lambda_k \in \mathbb{C}_{+}, 1 \leq k \leq N\}$ и $\{\tilde{\lambda}_k \in \mathbb{C}_{-}, 1 \leq k \leq N\}$ — простые нули соответственно s_{33} и \tilde{s}_{33} . Определим ядра v_k и \tilde{v}_k операторов соответственно $\ker J_{+}(\lambda_k)$ и $\ker J_{-}(\tilde{\lambda}_k)$ следующим образом:

$$J_{+}(\lambda_k)v_k = 0, \quad J_{-}(\tilde{\lambda}_k)\tilde{v}_k = 0, \quad 1 \leq k \leq N. \quad (44)$$

Остается найти свойства симметрии собственных векторов v_k и \tilde{v}_k . Эрмитово сопряжение первого уравнения в (44) и инволюция (40) дают

$$-\varepsilon v_k^{\dagger} C J_{-}(\tilde{\lambda}_k) = 0. \quad (45)$$

Отсюда и из второго из уравнений (44) получаем следующую инволюцию:

$$\tilde{v}_k = -\varepsilon v_k^{\dagger} C. \quad (46)$$

4. СОЛИТОННЫЕ РЕШЕНИЯ

Для нахождения солитонных решений следуем [29] (глава III, § 2). Положим в (32) $G = I$. Решение проблемы РГ имеет вид

$$J_{+}(\lambda) = I + \sum_{j,k=1}^N \frac{v_j W_{jk}^{-1} \tilde{v}_k}{\lambda - \tilde{\lambda}_k}, \quad (47)$$

где

$$W_{jk} = \frac{\tilde{v}_j v_k}{\lambda_j^* - \lambda_k}. \quad (48)$$

Нули λ_k и $\tilde{\lambda}_k$ от переменных не зависят. Зависимость векторов $v_k(s, t)$ находим, дифференцируя

уравнения (44) по s и t , используя соответствующие системы уравнений (23) или (24). В итоге находим

$$v_k(s, t) = \exp(i\lambda_k \Lambda z - 2i\lambda_k^2 \Lambda t + iw^2 t) v_k^{(0)}, \quad (49)$$

$$\tilde{v}_k(s, t) = \tilde{v}_k^{(0)} \exp(-i\lambda_k^* \Lambda z + 2i\lambda_k^{*2} \Lambda t - iw^2 t) C, \quad (50)$$

где $v_k^{(0)}, \tilde{v}_k^{(0)}$ — постоянные векторы, связанные инволюцией (46).

Из сравнения уравнений (34) и (47) находим

$$\Gamma_{13} = i \left[\sum_{j,k=1}^N v_j W_{jk}^{-1} \tilde{v}_k \right]_{13}, \quad (51)$$

$$\Gamma_{23} = i \left[\sum_{j,k=1}^N v_j W_{jk}^{-1} \tilde{v}_k \right]_{23}. \quad (52)$$

Обозначим $\theta_j = i\lambda_j z - 2i\lambda_j^2 t + iw^2 t$, $\lambda_j = \xi_j + i\eta_j$, $\xi_j, \eta_j \in \mathbb{R}$, $v_k^{(0)} = [\alpha_k, \beta_k, 1]^T$, и с учетом свойства симметрии (46) находим

$$R_{jk} = -\varepsilon \frac{w_+ \alpha_j^* \alpha_k + w_+ \beta_j^* \beta_k}{w}. \quad (53)$$

Используя (36) и (37), получаем N -солитонное решение системы (10):

$$p = \frac{2i\sqrt{2}w [-\Gamma_{13}w_+ e^{-iG(s)} + \Gamma_{23}g e^{iG(s)}]}{g^2 + w_+^2}, \quad (54)$$

$$q = -\frac{2i\sqrt{2}w [\Gamma_{13}g e^{-iG(s)} + \Gamma_{23}w_+ e^{iG(s)}]}{g^2 + w_+^2}, \quad (55)$$

где

$$\begin{bmatrix} \Gamma_{13} \\ \Gamma_{23} \end{bmatrix} = -i \sum_{j,k=1}^N \begin{bmatrix} \alpha_j \\ \beta_j \end{bmatrix} e^{\theta_j - \theta_k^*} W_{jk}^{-1} \quad (56)$$

и

$$W_{jk} = \frac{1}{\lambda_j^* - \lambda_k} \left[R_{jk} e^{\theta_j^* + \theta_k} + e^{-\theta_j^* - \theta_k} \right]. \quad (57)$$

Пусть $\varepsilon = -1$. Обозначим $R_{11} = \exp(-2\rho_{11})$. Однополюсное решение $N = 1$ (54), (55) имеет вид

$$\begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix} = \frac{2iw\sqrt{2}\eta_1 e^{\theta_1 - \theta_1^*}}{(g^2 + w_+^2) \operatorname{ch}(\theta_1^* + \theta_1 + \rho_{11})} \times \begin{bmatrix} (\alpha_1 w_+ e^{-iG(s)} - \beta_1 g e^{iG(s)}) \\ (\alpha_1 g e^{-iG(s)} + \beta_1 w_+ e^{iG(s)}) \end{bmatrix}. \quad (58)$$

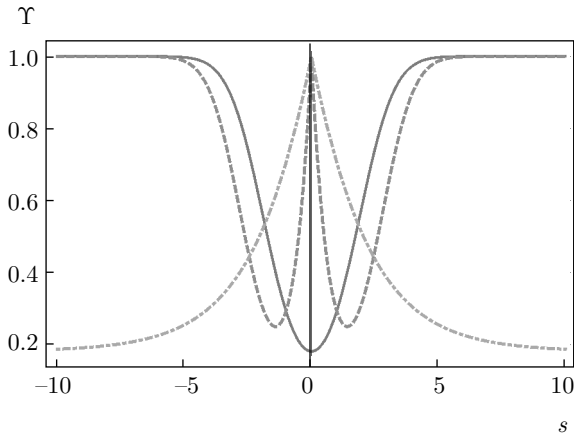


Рис. 2. Изменение поляризации Υ однополюсного решения под действием локального спин-орбитального взаимодействия. Сплошная линия отвечает потенциалу $g(s) = \exp(-0.25s^2)$, штриховая — $g(s) = s \exp(-0.25s^2)$, штрихпунктирная — $g(s) = \text{th}(0.25s)$. Параметры солитона следующие: $\eta_1 = 1, \xi_1 = 0, \alpha_1 = -1, \beta_1 = 1$

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В случае (19) пространственная модуляция амплитуды солитонов определяется фазой $G(s)$. Из решения (58) следует, что СОС вызывает локальное изменение поляризации электрона и ее динамика определяется как начальными условиями, так и параметрами СОС. Для однополюсного решения (см. формулу (58)) локальное дипольное поле приводит к отклонению вектора поляризации. Затем поляризация возвращается к исходному значению. На рис. 2 показано изменение поляризации электрона

$$\Upsilon = \frac{|p(s, 0)| - |q(s, 0)|}{|p(s, 0)| + |q(s, 0)|}$$

для солитонного решения (58) в случае (19) и разных внешних потенциалов $g(s)$. Для локализованного воздействия $G(s) \rightarrow 0, s \rightarrow \pm\infty$, угол поворота поляризации спина может быть детектором возмущения, вызванного внешним полем \mathcal{E} . С другой стороны, локальное поле, вызванное, например, постоянными дипольными моментами квантовых точек, расположенных по периметру кольца, может быть использовано для управления поляризацией электрона.

Двухсолитонное решение ($N = 2$) демонстрирует новые для уравнений Манакова свойства, обусловленные СОС. На рис. 3–5 показана амплитуда $|p(s, t)|$ в процессе столкновения двух солитонов для разных параметров и коэффициентов СОС в случае (18). Динамика солитонов для $h = 1, g = 0$ показана

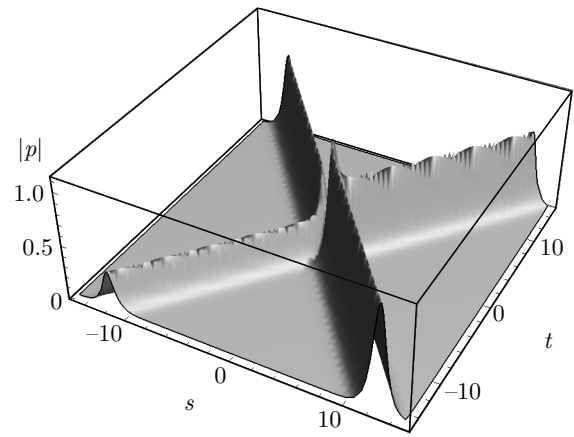


Рис. 3. Форма импульса $|p(s, t)|$. Столкновение двух солитонов с параметрами $\eta_1 = 1, \eta_2 = 1, \xi_1 = -0.4, \xi_2 = 0.4, \alpha_1 = 1, \alpha_2 = -1, \beta_1 = 0, \beta_2 = 1$, для коэффициентов СОС $h = 1, g = 0$

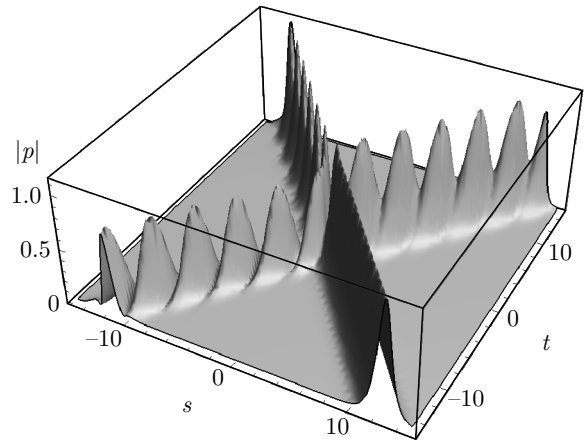


Рис. 4. Столкновение солитонов с параметрами $\eta_1 = 1, \eta_2 = 1, \xi_1 = -0.4, \xi_2 = 0.4, \alpha_1 = 1, \alpha_2 = -1, \beta_1 = 0, \beta_2 = 1$, для коэффициентов СОС $h = 1, g = 1$

на рис. 3. Решение проявляет характерную для солитонов уравнений Манакова динамику [30, 31, 36]. Влияние изменения фазы поля с координатой $\propto h$ не приводит к существенным отличиям поведения солитонов от поведения в случае классических уравнений Манакова [30].

Для сильного СОС $g \sim 1$ возникает пространственная модуляция амплитуд импульсов $|p|$ и $|q|$, см. рис. 4, 5. На рис. 4 видно, что включение СОС ($g \neq 0$) приводит к изменению амплитуд импульсов, наряду с появлением модуляции, для тех же начальных условий, ср. рис. 3. Решения обобщенной системы уравнений Манакова для $g \sim 1$ демонстрируют новый эффект — изменение и перенос пространственной модуляции между солитонами при их

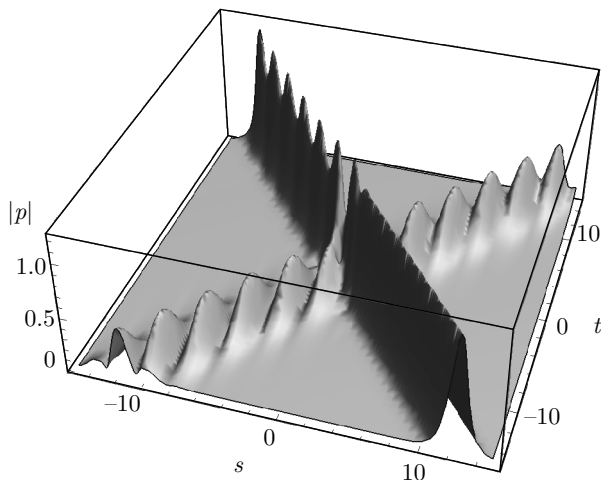


Рис. 5. Столкновение солитонов с такими же параметрами, как на рис. 4, кроме $\eta_2 = 0.5$

столкновении. На рис. 4 и 5 показана форма солитонов в процессе столкновения для разных начальных условий. Для некоторых параметров модуляция амплитуды исчезает после столкновения полностью. Этот эффект может быть использован для передачи информации между импульсами.

В настоящей работе дано интегрируемое обобщение модели Манакова с учетом спин-орбитального взаимодействия. Точные солитонные решения показывают, что сильная СОС вызывает пространственную модуляцию и необычное поведение солитонов во время столкновения. Это поведение критически зависит от начальных условий и коэффициента СОС. Полученные решения демонстрируют новые возможности управления поляризацией электронов полями диполей длинных спиральных молекул, таких как ДНК, или локальным внешним потенциалом, создаваемым дипольными органическими молекулами или квантовыми точками.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-02-00379).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. S. Davydov, *Phys. Scripta* **20**, 387 (1979).
2. M. Peyrard and A. R. Bishop, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2755 (1989).
3. S. Komineas, G. Kalosakas, and A. R. Bishop, *Phys. Rev. E* **65**, 061905 (2002).
4. P. Maniatis, G. Kalosakas, K. O. Rasmussen, and A. R. Bishop, *Phys. Rev. E* **72**, 021912 (2005).
5. E. Díaz, R. P. A. Lima, and F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. B* **78**, 134303 (2008).
6. B. Göhler, V. Hamelbeck, T. Z. Markus, M. Kettner, G. F. Hanne, Z. Vager, R. Naaman, and H. Zacharias, *Science* **331**, 894 (2011).
7. Z. Xie, T. Z. Markus, S. R. Cohen, Z. Vager, R. Gutiérrez, and R. Naaman, *Nano Lett.* **11**, 4652 (2011).
8. D. Mishra, T. Z. Markus, M. Naaman, R. Kettner, B. Gohler, H. Zacharias, N. Friedman, M. Sheves, and C. Fontanesi, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **110**, 14872 (2013).
9. O. B. Dor, S. Yochelis, S. P. Mathew, R. Naaman, and Y. Paltiel, *Nat. Commun.* **4**, 2256 (2013).
10. M. Kettner, B. Göhler, H. Zacharias, D. Mishra, V. Kiran, R. Naaman, C. Fontanesi, D. H. Waldeck, S. Şek, J. Pawlowski et al., *J. Phys. Chem. C* **119**, 14542 (2015).
11. P. C. Mondal, C. Fontanesi, D. H. Waldeck, and R. Naaman, *ACS Nano* **9**, 3377 (2015).
12. H. Einati, D. Mishra, N. Friedman, M. Sheves, and R. Naaman, *Nano Lett.* **15**, 1052 (2015).
13. V. Kiran, S. P. Mathew, S. R. Cohen, I. Hernandez Delgado, J. Lacour, and R. Naaman, *Adv. Mater.* **28**, 1957 (2016).
14. A. C. Aragonés, E. Medina, M. Ferrer-Huerta, N. Gimeno, M. Teixidó, J. L. Palma, N. Tao, J. M. Ugalde, E. Giralt, I. Díez-Pérez et al., *Small* **13**, 1602519 (2017).
15. G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
16. Ю. А. Бычков, Э. И. Рашба, *Письма в ЖЭТФ* **39**, 66 (1984).
17. D. L. Campbell, G. Juzeliunas, and I. B. Spielman, *Phys. Rev. A* **84**, 025602 (2011).
18. S. Yeganeh, M. A. Ratner, E. Medina, and V. Mujica, *J. Chem. Phys.* **131**, 014707 (2009).
19. E. Medina, F. López, M. A. Ratner, and V. Mujica, *Europhys. Lett.* **99**, 17006 (2012).
20. R. Gutiérrez, E. Díaz, R. Naaman, and G. Cuniberti, *Phys. Rev. B* **85**, 081404 (2012).
21. A.-M. Guo and Q.-F. Sun, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 218102 (2012).
22. A.-M. Guo, E. Díaz, C. Gaul, R. Gutierrez, F. Domínguez-Adame, G. Cuniberti, and Q.-F. Sun, *Phys. Rev. B* **89**, 205434 (2014).

23. D. Rai and M. Galperin, *J. Phys. Chem. C* **117**, 13730 (2013).
24. R. Gutiérrez, E. Díaz, C. Gaul, T. Brumme, F. Domínguez-Adame, and G. Cuniberti, *J. Phys. Chem. C* **117**, 22276 (2013).
25. E. Medina, L. A. Gonzalez-Arraga, D. Finkelstein-Shapiro, B. Berche, and V. Mujica, *J. Chem. Phys.* **142**, 194308 (2015).
26. S. Behnia, S. Fathizadeh, and A. Akhshani, *J. Phys. Chem. C* **120**, 2973 (2016).
27. R. A. Caetano, *Sci. Rep.* **6**, 23452 (2016).
28. В. Е. Захаров, А. Б. Шабад, *ЖЭТФ* **61**, 118 (1971) [*Sov. Phys. JETP* **34**, 62 (1972)].
29. S. P. Novikov, S. V. Manakov, L. P. Pitaevskii, and V. E. Zakharov, *Theory of Solitons: The Inverse Scattering Method*, Springer-Verlag (1984).
30. С. В. Манаков, *ЖЭТФ* **65**, 1392 (1973) [*Sov. Phys. JETP* **38**, 248 (1974)].
31. R. Radhakrishnan, M. Lakshmanan, and J. Hietarinta, *Phys. Rev. E* **56**, 2213 (1997).
32. T. Tsuchida, *Prog. Theor. Phys.* **111**, 151 (2004).
33. A. V. Mikhailov, *Physica D* **3**, 73 (1981).
34. V. E. Zakharov and E. I. Schulman, *Physica D* **4**, 270 (1982).
35. J. Ieda, T. Miyakawa, and M. Wadati, *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 2996 (2004).
36. Deng-Shan Wang, Da-Jun Zhang, and Jianke Yang, *J. Math. Phys.* **51**, 023510 (2010).
37. A. A. Zabolotskii, *Phys. Rev. E* **75**, 036612 (2007).
38. A. A. Zabolotskii, *Phys. Rev. E* **77**, 036603 (2008).
39. A. A. Zabolotskii, *Phys. Rev. A* **80**, 063616 (2009).
40. E. Díaz, R. Gutiérrez, C. Gaul, G. Cuniberti, and F. Domínguez-Adame, *AIMS Mater. Sci.* **4**, 1052 (2017).
41. D. Sengupta, R. N. Behera, J. C. Smith, and G. M. Ullmann, *Structure* **13**, 849 (2005).
42. R. Gutiérrez, E. Díaz, R. Naaman, and G. Cuniberti, *Phys. Rev. B* **85**, 081404 (2012).