

# Energietransfer auf nichtlinearen Doppelketten

Im Fachbereich Physik  
der Freien Universität Berlin eingereichte  
Dissertation  
von Alexander Bülow

Berlin 2001

**1. Gutachter Prof. Dr. H. Gabriel**

**2. Gutachter Prof. Dr. J. Bosse**

Termin der Disputation: 12.11.2001

# Glossar

Bezeichnung	Größe	Dimension
$\psi_n, \phi_n, \Psi_n, \Phi_n$	dynamische Variable	Abhängig von der physikalischen Realisierung des Doppelketten-systems. Z.B. Aufenthaltswahrscheinlichkeitsamplitude (Exziton- bzw. Polarontransfer), elektromagnetische Feldgröße bzw. Lichtintensität (Optik), Spannungen (elektrische Netzwerke)
$H$	Hamiltonfunktion	Energie
$\epsilon_n, E_n^\psi, E_n^\phi$	On-Site-Energie	Energie
$V_n^\psi, V_n^\phi$	Hopping-Parameter, d. h. ketteninterner Kopplungsparameter	1/Zeit
$\kappa, \kappa_0, \kappa(n)$	Kopplungsparameter zur Nachbarkette	1/Zeit
$\gamma$	Nichtlinearitätsparameter	Bestimmt durch die Dimension der auftretenden dynamischen Variable: $1/(\dim [\psi]^2 * \text{Zeit})$
$\mu$	Nichtlinearitätsparameter	Bestimmt durch die Dimension der auftretenden dynamischen Variable: $1/(\dim [\psi]^2)$
$\omega, \omega^\psi, \omega^\phi$	Frequenzen der Kettenoszillatoren	1/Zeit
$\tau$	Dimensionslose Basiseinheit der Zeit in dynamischen Untersuchungen. Produkt aus numerischem Zeitintervall und ketteninternem Kopplungsparameter	
$a_n, b_n, x_n, y_n, u_n, v_n, A_{\psi, \phi}$	Amplitude eines Wellenansatzes bzw. einer energetischen Anregung	Bestimmt durch die Dimension der auftretenden dynamischen Variable: $\dim [\psi]^2$

<b>Bezeichnung</b>	<b>Größe</b>
$K, L, i_D, i_A, \mathcal{I}$	Indexmenge (Definition siehe Abschnitt 1.1.1)
$D, A$	Donator bzw. Akzeptorgebiet
$A$	Abbildungsvorschrift
$\vec{F}$	ungestörter Anteil der Abbildung
$\vec{G}$	Störungsanteil der Abbildung
$\vec{M}, M_1, M_2$	Melnikovvektor, Melnikovvektorkomponente
$S_n(x)$	$sech(n\beta - x)$
$T_n(x)$	$tanh(n\beta - x)$
$s, t$	Kurvenparameter
$n, n_0, x_0, y_0$	Kettenplatznummer
$\sigma$	Parameter der "Breite" des Kopplungsgebietes
$\delta_{1,2}$	Phase der Frequenzen
$v_g$	Gruppengeschwindigkeit der Solitonstruktur
$\alpha$	Skalierungsparameter der Kopplungsstärke
$C_{\psi, \phi}$	Geschwindigkeitsparameter der Phasendrift
$B_{\psi, \phi}$	Parameter der inversen "Breite" der energetischen Anregung

# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1 Das Modellsystem einer nichtlinearen Doppelkette</b>	<b>5</b>
1.1 Die Grundgleichungen . . . . .	6
1.1.1 Das DST-System als Donator-Akzeptor-System . . . . .	11
1.1.2 Das Ablowitz-Ladik-System . . . . .	16
1.1.3 Das GDNLS-System . . . . .	17
1.1.4 Die Kopplung der Kettenoszillatoren . . . . .	19
1.1.5 Die On-Site-Energie . . . . .	23
<b>2 Nichtlinearität und homoklines Chaos als Voraussetzung von Stabilität</b>	<b>25</b>
2.1 Die vierdimensionale Abbildung . . . . .	26
2.2 Allgemeine Definition des Melnikovvektors . . . . .	33
2.3 Der Melnikovvektor der GDNLS-Doppelkette . . . . .	37
2.3.1 Das ungestörte System als Repräsentant einer integrablen Ablowitz-Ladik-Kette . . . . .	42
2.3.2 Die Komponenten des Melnikovvektors . . . . .	44
2.3.3 Der homokline Orbit . . . . .	54
2.4 Solitonartige Dynamik und Breatherlösungen . . . . .	57
2.4.1 Einführung einer dimensionslosen Systemzeit . . . . .	58
2.5 Fitfunktion der Amplitudenverteilung . . . . .	61
<b>3 Numerische Simulationen der Energietransferdynamik</b>	<b>65</b>
3.1 Zusammenhängende Kopplungsgebiete mit konstanter Kopplungsstärke	69
3.1.1 Die Bewegungsgleichungen . . . . .	69
3.2 Numerische Simulation der Amplitudendynamik . . . . .	71

3.3	Diskussion der numerischen Resultate . . . . .	82
3.3.1	Kopplungsfelder . . . . .	85
3.4	Kopplungsgebiete mit gaußverteilter Kopplungsstärke . . . . .	88
3.5	Stochastische On-Site-Energie als Modell für Störungen und energietische Fluktuationen . . . . .	94
3.6	Schalt- und Speicherprozesse . . . . .	95
<b>4</b>	<b>Analyse der Energietransfermechanismen</b>	<b>101</b>
4.1	Die differentielle Energieänderung . . . . .	101
4.2	1. Fall: Energietransfer zwischen identischen Ketten . . . . .	106
4.2.1	Die integrale Energieänderung . . . . .	109
4.2.2	Einfluß der Phasenverschiebungen $\delta_i$ auf $\Delta H$ . . . . .	112
4.3	2.Fall: Berechnung des Energietransfers zwischen unterschiedlichen Ketten . . . . .	114
4.3.1	Die Gruppengeschwindigkeit der Solitonstruktur . . . . .	120
4.3.2	Zusammenhang zwischen integraler Energieänderung, Kopplungsgebiet und Gruppengeschwindigkeit . . . . .	121
4.3.3	Zusammenhang zwischen Frequenzdifferenz und Kopplungsbreite bei Maximierung des Energieübertrags . . . . .	122
4.3.4	Vergleich der Ergebnisse mit den Amplitudensimulationen der diskreten Kopplung . . . . .	124
	<b>Zusammenfassung der Ergebnisse</b>	<b>127</b>
<b>A</b>	<b>Realisierung eines nichtlinearen Doppelkettensystems in Form eines elektrischen Netzwerks</b>	<b>131</b>
<b>B</b>	<b>Der Melnikovvektor der AL-Kette für konstante Kopplung <math>\kappa_0 = \alpha</math> auf sämtlichen Kettengliedern</b>	<b>137</b>
B.1	Fundamentale Lösungsmatrizen . . . . .	139
B.2	Elliptische Integrale und Jacobi elliptische Funktionen . . . . .	140
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>143</b>

## Lebenslauf

### Persönliche Daten:

Name: Alexander Bülow

Geburtsdatum: 2. November 1967

Geburtsort: Frankfurt am Main

1974-1978	Geschwister-Scholl-Grundschule Mühlheim-Dietesheim
1978-1980	Förderstufe an der Friedrich-Ebert-Schule Mühlheim
1980-1987	Friedrich-Ebert-Gymnasium Mühlheim
1987	Abitur
1987-1988	Studium der Chemie an der J.-W.-von-Goethe-Universität in Frankfurt a. M.
1988-1994	Studium der Mathematik und Physik an der J.-W.-von-Goethe-Universität in Frankfurt a. M. Während dieser Zeit Arbeitstätigkeiten auf den Gebieten der Schülernachhilfe, im Musikkonzertbereich und im Baugewerbe. Längere Auslandsaufenthalte in Norwegen. Dort Arbeitstätigkeiten in einem forstwirtschaftlichen Betrieb und in einer Meerwasser-Fischzuchtanlage
1994	Vordiplom Physik an der J.-W.-von-Goethe-Universität in Frankfurt a. M.
1994-1997	Hauptstudium der Physik an der Freien Universität Berlin
August 1996	Vorgezogene Nebenfach Diplomprüfung am Fachbereich Geophysik
1996-1997	Anfertigung der Diplomarbeit am Institut für Theoretische Physik der Freien Universität Berlin, Arbeitsgruppe Professor Dr. H. Gabriel
1998 bis 2001	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theoretische Physik, FU-Berlin. Tätigkeiten in Lehre und Forschung
Oktober 2001	Einreichung der Dissertationsschrift
November 2001	Disputation

# Danksagung

Abschließend möchte ich mich bei der gesamten Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Dr. H. Gabriel für die freundliche Unterstützung bei der Anfertigung meiner Doktorarbeit bedanken.

Prof. Dr. Gabriel war allseits ein wünschenswerter Betreuer, der mich ständig motivierte und immer gerne als kompetenter Ansprechpartner zur Verfügung stand.

Herrn Prof. Dr. J. Bosse, Dr. D. Hennig, Dr. A. Schlindwein, T. Blaschke, B. Brüggemann, N. Jaster, G. Weißgerber, J. Agarwal und S. Komarnicki danke ich für Hilfestellungen und anregende Gespräche.

Für die sehr freundliche Hilfe bei allen EDV- und Betriebssystemfragen bin ich Herrn Dr. H. Schröder sehr dankbar.

Weiterhin möchte ich Herrn A. Stadler für die nächtliche Druck- und Grafikerunterstützung danken.

Frau Tamara Ascherl war während der gesamten Entstehungszeit dieser Arbeit schlichtweg unersetzlich. Danke.