

Kapitel 4

Analyse der Energietransfermechanismen

4.1 Die differentielle Energieänderung

Der Energieaustausch zwischen den Ketten wird (siehe Kapitel 3) als zeitliche Änderung der Hamiltonfunktion einer Kette (o. B. d. A. Kette H_1) berechnet. Die Ausdrücke für die verschiedenen Diskretisierungen (Kapitel 1) der nichtlinearen Schrödingergleichung für dH/dt lauten:

Der Energietransfer auf einer DST-Doppelkette ist:

$$\frac{dH_1}{dt} = \{H_1, H_{gesamt}\} = \{H_1, H_{int}\} = -i \sum_n \left(\frac{\partial H_1}{\partial \psi_n} \frac{\partial H_{int}}{\partial \psi_n^*} - \frac{\partial H_1}{\partial \psi_n^*} \frac{\partial H_{int}}{\partial \psi_n} \right).$$

Mit Berücksichtigung des Normierungsterms in der Gaußfunktion lauten die partiellen Ableitungen:

$$\frac{\partial H_1}{\partial \psi_n} = (-V^\psi (\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) - \gamma_1 |\psi_n|^2 \psi_n^* + E_n^\psi \psi_n^*),$$

$$\frac{\partial H_1}{\partial \psi_n^*} = (-V^\psi (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) - \gamma_1 |\psi_n|^2 \psi_n + E_n^\psi \psi_n),$$

$$\frac{\partial H_{int}}{\partial \psi_n^*} = -\kappa(n) \phi_n,$$

$$\frac{\partial H_{int}}{\partial \psi_n} = -\kappa(n) \phi_n^*,$$

mit:

$$\kappa(n) = \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(\frac{-(n - n_0)^2}{2\sigma^2}\right).$$

Daraus folgt:

$$\{H_1, H_{int}\}_{DST} = 2 \sum_n \text{Im} \left\{ \kappa(n) (V^\psi (\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) + \gamma_1 |\psi|^2 \psi_n^* - E_n^\psi \psi_n^*) \phi_n \right\}. \quad (4.1)$$

Eine entsprechende Rechnung liefert unter Benutzung der erweiterten Poissonklammern gemäß Abschnitt 1.1.2 einen Ausdruck für den Energieaustausch auf einer GDNLS-Doppelkette:

$$\{H_1, H_{int}\}_{GDNLS} = 2 \sum_n \text{Im} \left\{ \kappa(n) (V^\psi (1 + \mu |\psi_n|^2) (\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) + \gamma_1 |\psi|^2 \psi_n^* - E_n^\psi \psi_n^*) (1 + \mu |\psi_n|^2) \phi_n \right\} \quad (4.2)$$

Und für die Ablowitz-Ladik-Kette gilt:

$$\{H_1, H_{int}\}_{AL} = 2 \sum_n \text{Im} \left\{ \kappa(n) (V^\psi (1 + \mu |\psi_n|^2) (\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) - E_n^\psi \psi_n^*) (1 + \mu |\psi_n|^2) \phi_n \right\}. \quad (4.3)$$

Man sieht, daß die Ausdrücke für den differentiellen Energieaustausch Summen über die zeitabhängigen Amplituden $\psi_n(t)$ und $\phi_n(t)$ darstellen. Es existieren aber keine geschlossenen Ausdrücke für die Zeitentwicklung der Amplituden, da die Doppelketten-systeme aufgrund ihrer Dimension und Nichtlinearität nichtintegabel sind. Aber in Abschnitt 2.4 zeigte das Anpassen der eindimensionalen Ablowitz-Ladik-Lösung als Fitfunktion für die Amplitudenverteilung, die mit Hilfe des homoklinen Orbits berechnet wurde, sehr gute Übereinstimmung mit der Originalkonfiguration, wenn eine stabile Anfangsverteilung der Amplituden fernab von einem räumlich kleinen Kopplungsgebiet, verglichen mit der gesamten Ausdehnung der Kette, aufgesucht wird.

In Abschnitt 3.2 wurde durch die numerische Simulation gezeigt, daß modifizierte AL-Fitkurven durchaus auch große Stabilität auf DST-Doppelketten zeigen können. Diese Tatsache wollen wir uns im Folgenden zunutze machen, um analytische Ausdrücke der Amplitudendynamik in Form von modifizierten AL-Solitonen in die Berechnungen des Energieaustausches (4.1, 4.2, 4.3) einsetzen zu können.

Zu diesem Zweck wird gezeigt, daß die ein- und auslaufende solitonartige Struktur vor und nach Durchlaufen des Kopplungsgebietes mit Ablowitz-Ladik-Fitfunktionen

gut beschrieben werden kann. Als Beispiel wird die Transferdynamik einer GDNLS-Kette verwendet. Startkonfiguration ist die Amplitudenverteilung, die direkt aus dem homoklinen Orbit folgt.

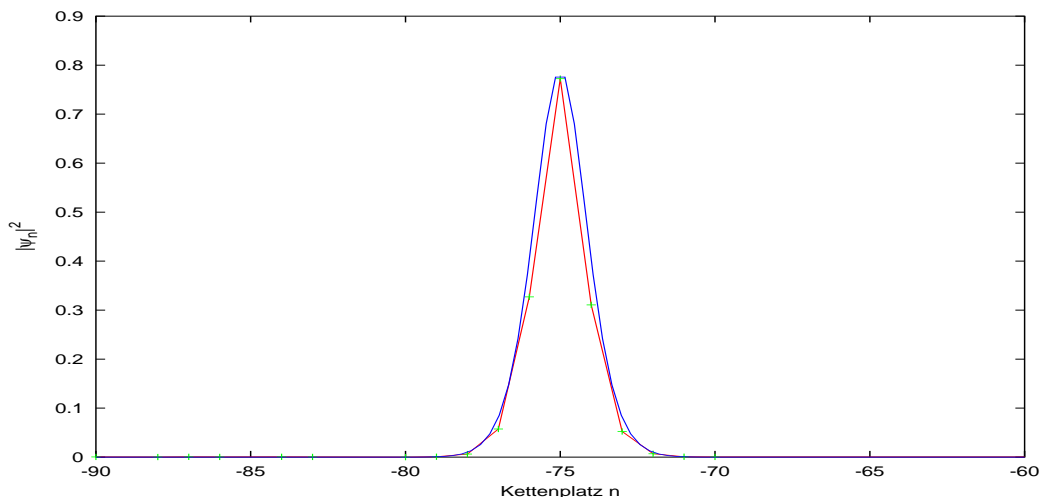


Abbildung 4.1-1: AL-Fitfunktion (blau) an die Amplitudenquadrate der ψ -Kette nach 0.46τ . Die durch numerische Integration berechneten Amplituden(quadrate) $|\psi_n|^2$, die sich aufgrund einer Startkonfiguration aus dem homoklinen Orbit ergeben, lassen sich durch $|\Psi_n^{AL}|^2$ mit $\beta = 0.8$ und $\mu = 1$ in guter Näherung beschreiben.

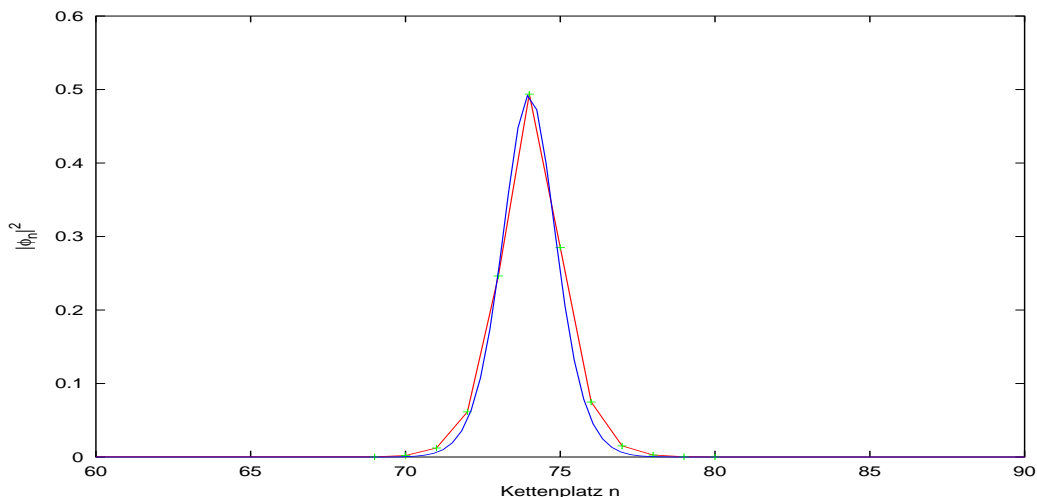


Abbildung 4.1-2: AL-Fitfunktion (blau) an die Amplitudenquadrate der ϕ -Kette nach dem Durchlaufen des Kopplungsgebietes bei 3.34τ . Die durch numerische Integration berechneten Amplituden(quadrate) $|\phi_n|^2$, die sich aufgrund einer Startkonfiguration aus dem homoklinen Orbit ergeben, haben sich durch den Einfluß des Kopplungsgebietes nur leicht gegenüber der ψ -Kette verformt. Sie lassen sich dennoch durch $|\Psi_n^{AL}|^2$ mit $\beta = 0.8$ und $\mu = 1.6$ in guter Näherung beschreiben.

Die Amplitudendynamik innerhalb des Kopplungsgebietes ist äußerst komplex und sehr kompliziert. Dennoch stabilisiert die ϕ -Kette durch Selbstlokalisationsprozesse nach Durchschreiten der Kopplungsbrücken die solitonartige Struktur wieder in der charakteristischen *sech*-Form. Dies ist die Motivation, das AL-Soliton (2.21) in den analytischen Ausdrücken für den Energieaustausch dH/dt zu verwenden, obwohl über die Verteilung der Amplituden innerhalb des Kopplungsgebietes, (für große $\kappa(n)$) keine Aussage gemacht werden kann.

Da wir uns aufgrund mannigfaltiger numerischer Simulationen vergewißert haben, daß sich ein gerichteter Energietransfer lokalisierter Energie gut mit Hilfe von solitonartigen Strukturen beschreiben läßt (siehe auch [9]), benutzen wir bei den folgenden Untersuchungen die solitonartigen AL-Lösungen:

$$\begin{aligned}\psi_n(t) &= A_\psi \operatorname{sech}(B_\psi(n - u_\psi t - x_0)) \exp(-i(\omega_\psi t + C_\psi n + \delta_1)), \\ \phi_n(t) &= A_\phi \operatorname{sech}(B_\phi(n - u_\phi t - y_0)) \exp(-i(\omega_\phi t + C_\phi n + \delta_2)),\end{aligned}\quad (4.4)$$

mit:

- $A_{\psi, \phi}$ = Amplitude der Kettenplatzschwingung,
- $B_{\psi, \phi}$ = Parameter, der die inverse Breite der *sech*-Funktion bestimmt,
- $C_{\psi, \phi}$ = Geschwindigkeitsparameter, der die Fortpflanzung der Oszillation bestimmt,
- $u_{\psi, \phi}$ = Ausbreitungsgeschwindigkeit,
- x_0, y_0 = Kettenplatz, an dem das Maximum der Anfangsamplituden liegt,
- $\omega_{\psi, \phi}$ = Frequenz der Oszillatoren,
- $\delta_{1, 2}$ = Phasenverschiebung,

wobei gemäß Abschnitt 2.3.1 die Parameter $B_{\psi, \phi}$, $u_{\psi, \phi}$ und $A_{\psi, \phi}$ der analytischen Solitonenlösung der eindimensionalen Ablowitz-Ladik-Kette durch

$$B_{\psi, \phi} = \log \left(-\frac{\omega_{\psi, \phi}}{2 \cos(C_{\psi, \phi})} + \sqrt{\frac{\omega_{\psi, \phi}^2}{4 \cos^2(C_{\psi, \phi})} - 1} \right)$$

$$u_{\psi, \phi} = \frac{2 \sin(C_{\psi, \phi}) \sinh(B_{\psi, \phi})}{B_{\psi, \phi}}$$

und

$$A_{\psi, \phi} = \frac{\sinh(B_{\psi, \phi})}{\sqrt{\mu}}$$

festgelegt sind.

Wird der Ansatz (4.4) z. B. in (4.1) eingesetzt, ergibt sich:

$$\begin{aligned} \{H_1, H_{int}\} = & \\ & 2A_{\psi}A_{\phi} \sum_n \left\{ \kappa(n) \left[V^{\psi} (\operatorname{sech}(B_{\psi}((n+1) - u_{\psi}t - x_0))) \right. \right. \\ & \times \sin((\omega_{\psi} - \omega_{\phi})t + (C_{\psi} - C_{\phi})n + (\delta_1 - \delta_2) + C_{\psi}) \\ & + \operatorname{sech}(B_{\psi}((n-1) - u_{\psi}t - x_0)) \sin((\omega_{\psi} - \omega_{\phi})t + (C_{\psi} - C_{\phi})n + (\delta_1 - \delta_2) - C_{\psi})) \\ & + \operatorname{sech}(B_{\psi}(n - u_{\psi}t - x_0)) \sin((\omega_{\psi} - \omega_{\phi})t + (C_{\psi} - C_{\phi})n + (\delta_1 - \delta_2)) \\ & \times \left. \left(\gamma A_{\psi}^2 \operatorname{sech}^2(B_{\psi}(n - u_{\psi}t - x_0)) - E_n \right) \right] \\ & \times \left. \operatorname{sech}(B_{\phi}(n - u_{\phi}t - y_0)) \right\}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Die physikalischen Aussagen, die in diesem Ausdruck für den Energieaustausch stehen, sollen in den folgenden Abschnitten anhand der Auswirkung der verschiedenen Parameter, insbesondere der Breite des Kopplungsgebietes, der Kopplungsstärke und der Transfergeschwindigkeit, erörtert werden.

Zur Berechnung dieses Ausdrucks für die zeitliche Änderung der Energie auf der Ψ -Kette werden zwei Fälle unterschieden:

1. Sämtliche Parameter sind auf beiden Kettensträngen identisch, insbesondere die Frequenzen der Kettenoszillatoren. Dies entspricht der Modellierung einer physikalischen Situation, in der beide Ketten aus den gleichen Grundbausteinen bestehen. Diese Grundbausteine können sowohl einzelne Atome, Gruppen von Atomen als auch ganze Molekülgruppen repräsentieren, die an

festen Kettenplätzen gebunden sind und auf die gesamte Kette hinsichtlich der Transferdynamik wie *ein* Oszillator wirken.

2. Die Frequenzen der Kettenoszillatoren sowie die übrigen Parameter werden auf jedem Kettenstrang unterschiedlich gewählt. Die physikalische Realität, welche mit diesem Modell beschrieben werden soll, ist ein Doppelstrang, der aus unterschiedlichen Grundbausteinen zusammengesetzt ist. Jede Kette beinhaltet eine andere Art von Oszillatoren (z. B. Atome, Moleküle u. dgl.).

Im Folgenden wird der letztere, allgemeinere Fall im Vordergrund stehen. Jedoch werden beide Fälle zunächst getrennt voneinander untersucht.

4.2 1. Fall: Energietransfer zwischen identischen Ketten

Mit den Substitutionen

$$\begin{aligned} B_\psi(n - x_0 - u_\psi t) &= Z_\psi, \\ B_\psi((n + 1) - x_0 - u_\psi t) &= Z_\psi^+, \\ B_\psi((n - 1) - x_0 - u_\psi t) &= Z_\psi^-, \end{aligned} \tag{4.6}$$

$$\begin{aligned} B_\phi(n - y_0 - u_\phi t) &= Z_\phi, \\ (\omega_\psi - \omega_\phi)t + (C_\psi - C_\phi)n + (\delta_1 - \delta_2) &= Y, \end{aligned} \tag{4.7}$$

folgt für den Energieaustauschterm der DST-Kette (4.5):

$$\begin{aligned} \{H_1, H_{int}\} &= 2A_\psi A_\phi \sum_n \left\{ \kappa(n) \left[V_1 (\operatorname{sech}(Z_\psi^+) \sin(Y + C_\psi) + \operatorname{sech}(Z_\psi^-) \sin(Y - C_\psi)) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (\gamma_\psi A_\psi^2 \operatorname{sech}^2(Z_\psi) - E_n^\psi) \operatorname{sech}(Z_\psi) \sin(Y) \right] \operatorname{sech}(Z_\phi) \right\}. \end{aligned}$$

Unter der Annahme, daß die Ketten und damit sämtliche Systemparameter und die solitonartige Struktur vor und nach Durchlaufen des Kopplungsgebietes identisch

sind

$$\omega_\psi = \omega_\phi, \quad C_\psi = C_\phi, \quad \delta_1 = \delta_2,$$

$$\implies \quad Z_\psi = Z_\phi = Z, \quad Z_\psi^\pm = Z_\phi^\pm = Z^\pm, \quad Y = 0,$$

ergibt sich:

$$\begin{aligned} \{H_1, H_{int}\} &= 2A_\psi^2 \sum_n \kappa(n) \left\{ V^\psi \left(\operatorname{sech}(Z^+) \sin(C_\psi) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \operatorname{sech}(Z^-) \sin(-C_\psi) \right) \operatorname{sech}(Z) \right\}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Die Zeitabhängigkeit der Funktion (4.8) ist nachfolgend für einen festen Parametersatz und verschiedene Kopplungsbreiten einer Verteilung der Kopplungsstärke mit Normierungsterm

$$\kappa(n) = \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(\frac{-(n - n_0)^2}{2\sigma^2}\right)$$

dargestellt. Die weiteren gewählten Parameter sind:

$$\begin{aligned} \alpha &= 0.1, & \gamma &= 1.2, \\ n_0 &= 0, & C_{\psi,\phi} &= 0.4, \\ y_0 &= -100, & \omega_{\psi,\phi} &= -2.4, \\ x_0 &= -100, & \delta_{1,2} &= 0, \\ V &= 1, & E_n &= 0. \end{aligned} \quad (4.9)$$

(Zu Dimensionen und Einheiten siehe Glossar bzw. Anmerkung in der Einleitung).

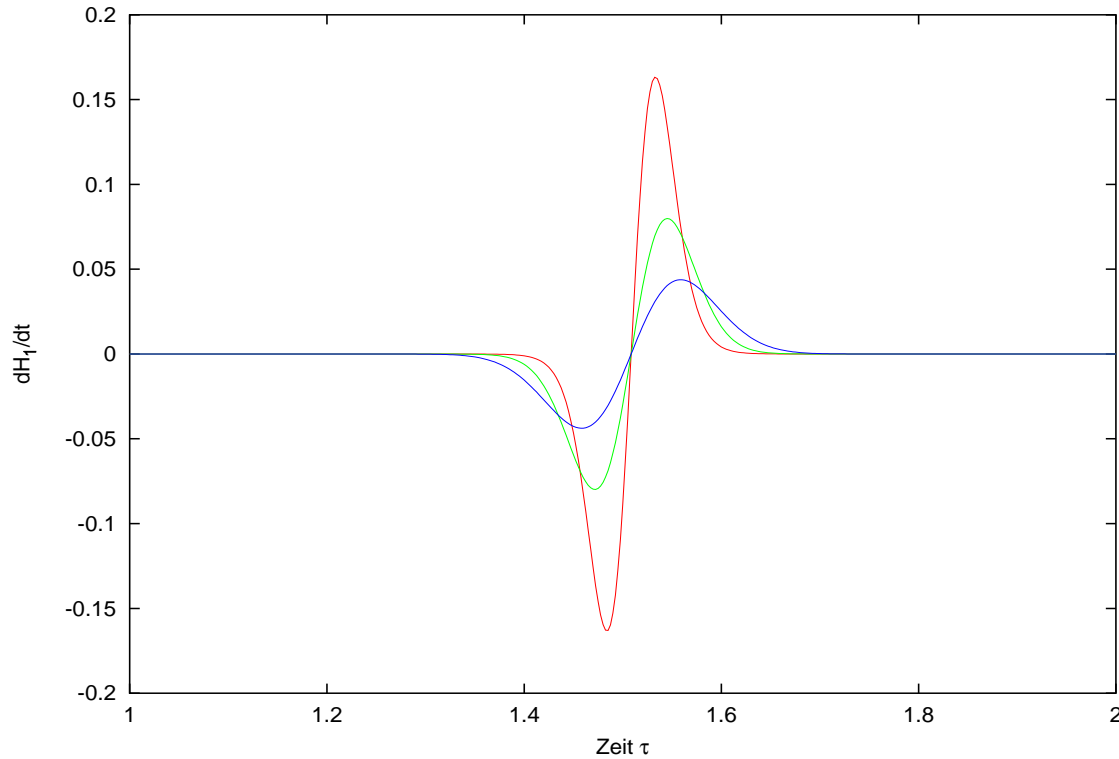


Abbildung 4.2-1: Differentielle Energieänderung dH_1/dt gemäß (4.8) für unterschiedliche Breiten σ des Kopplungsgebietes: $\sigma = 1$ (rot), $\sigma = 2$ (grün), $\sigma = 3$ (blau). Je breiter das Kopplungsgebiet ist, umso länger ist auch die Wechselwirkungszeit beider Ketten. Allerdings heben sich positive und negative Werte der Energieänderung exakt auf. Der Energieübertrag ist somit für alle σ -Werte gleich Null. Ein Energieübertrag zwischen identischen Ketten ist nicht möglich, wenn die Parameter der solitonartigen Struktur vor und nach dem Kopplungsgebiet identisch gewählt werden. Dabei ist es unerheblich, ob $\kappa(n)$ mit oder ohne Normierung gewählt wird.

Der Schwerpunkt der Anregung liegt auf der ψ -Kette bei Kettenplatz $n = x_0 = -100$. Die solitonartige Struktur pflanzt sich in Richtung des Gebietes mit größerer Kopplung fort. Nach einer bestimmten Laufzeit (siehe Abschnitt 4.3.2) setzt dann die Änderung der ψ -Kettenenergie ein. Je nach Breite des Gebietes, d. h. je nach Größe des Parameters σ , setzt die Energieänderung der ψ -Kette früher oder später ein. Die Abbildung 4.2-1 zeigt, daß das Ausmaß der positiven und negativen Energieänderung völlig symmetrisch ist. Die positiven und negativen Anteile heben sich auf. Ein Energieübertrag zwischen identischen Ketten ist nicht möglich, falls angenommen wird, daß die solitonartige Struktur beim Durchgang durch das Kopp-

lungsgebiet unverändert bleibt.

Ein gänzlich anderes Bild zeigt sich, wenn angenommen wird, daß die Parameter in (4.4) auf beiden Ketten unterschiedlich gewählt werden, wie in den nächsten Abschnitten gezeigt wird.

Zunächst wird jedoch eine weitere Größe eingeführt, die als Maß für die gesamte übertragene Energie nach dem Durchlaufen des Kopplungsgebietes dient.

4.2.1 Die integrale Energieänderung

Gleichung (4.1) beschreibt die differentielle Energieänderung pro Zeitintervall. Es ist sinnvoll, als zusätzliches Maß für den Energietransfer die Gesamtänderung während der kompletten Transferdauer T , d. h.

$$\Delta H(T) = 2 \int_0^{t=T} dt \sum_n \text{Im} \left\{ (V^\psi (\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) + \gamma_1 |\psi_n|^2 \psi_n^* - E_n^\psi \psi_n^*) \kappa(n) \phi_n \right\} \quad (4.10)$$

zu benutzen. Nach dem Zeitintervall $t = T$ soll der gesamte Transferprozeß abgeschlossen sein. T ist abhängig vom Abstand zwischen Anregung und Kopplungsgebiet sowie von der Transfergeschwindigkeit (Abschnitt 4.3.2).

Nach Einsetzen der bewegten solitonartigen Struktur (4.4), ergibt sich bei Wahl gleicher Systemparameter auf beiden Ketten, aber diesmal mit unterschiedlichen Phasen im Solitonansatz $\delta_1 \neq \delta_2$:

$$\begin{aligned} \Delta H &= \int_T dt \{H_1, H_{int}\} \\ &= 2A_\psi^2 \int_T dt \sum_n \left\{ \left[V^\psi (\text{sech}(Z^+) \sin(C_\psi + \Delta\delta) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \text{sech}(Z^-) \sin(-C_\psi + \Delta\delta)) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \text{sech}(Z) \sin(\Delta\delta) (\gamma A_\psi^2 \text{sech}^2(Z) - E_n) \right] \right. \\ &\quad \left. \times \kappa(n) \text{sech}(Z) \right\}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Die Berechnung der differentiellen Energieänderung (Abbildung 4.2.1-1) und des integralen Energietransfers (Abbildung 4.2.1-2) zeigt:

Mit unterschiedlichen Solitonansätzen in der Phase der aufgeprägten Oszillation $\Delta\delta \neq 0$, aber weiterhin identischen Kettenparametern findet für kleine σ ein linear mit σ steigender Energieübertrag vom ersten auf den zweiten Strang statt.

Die Abbildung 4.2.1-1 zeigt deutlich die Dominanz der Kopplungsfunktion $\kappa(n)$ in der zu berechnenden Summe (4.8). Mit dem vereinfachten Ansatz

$$\begin{aligned} \int_T dt \{H_1, H_{int}\} &\approx \int_T dt \alpha \exp\left(-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma^2}\right) \\ &= \alpha\sqrt{2\pi}\sigma = \Delta H(\sigma) \end{aligned}$$

wird die lineare σ -Abhängigkeit sofort klar.

Jedoch ist dies nur eine grobe Approximation, da (4.8) für $\kappa(n)$ mit Normierung ebenfalls einen schwachen linearen Anstieg zeigt, obwohl mit obiger Abschätzung eine konstante Abhängigkeit zu erwarten wäre.

Die folgenden Abbildungen (4.2.1-1 bis 4.2.1-3) zeigen das Systemverhalten, welches jeweils mit Hilfe von Ablowitz-Ladik-Lösungen als Ansatz für die Energieübertragung berechnet wurde, anhand der differentiellen und integralen Energieänderung. Zum Vergleich ist in Abbildung 4.2.1-4 der Energieübertrag mit Hilfe der weitaus aufwendigeren Integration der Bewegungsgleichungen berechnet. Es zeigt sich, daß die integrale Energieänderung $\Delta H(T)$ das qualitative Systemverhalten gut wiedergibt.

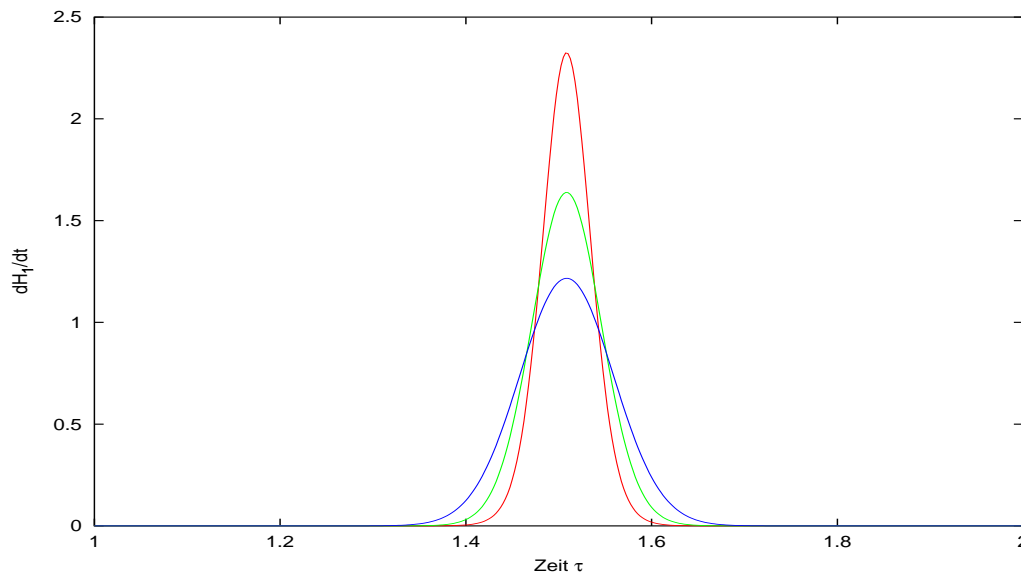


Abbildung 4.2.1-1: Differentielle Energieänderung dH_1/dt für unterschiedliche Kopplungsbreiten. $\sigma = 1$ (rot), $\sigma = 2$ (grün), $\sigma = 3$ (blau). Die Doppelkette, bestehend aus zwei identischen Ketten, wurde mit unterschiedlichen Phasen der solitonartigen Strukturen (4.4) angeregt $\delta_1 = \pi/2$ und $\delta_2 = 0$.

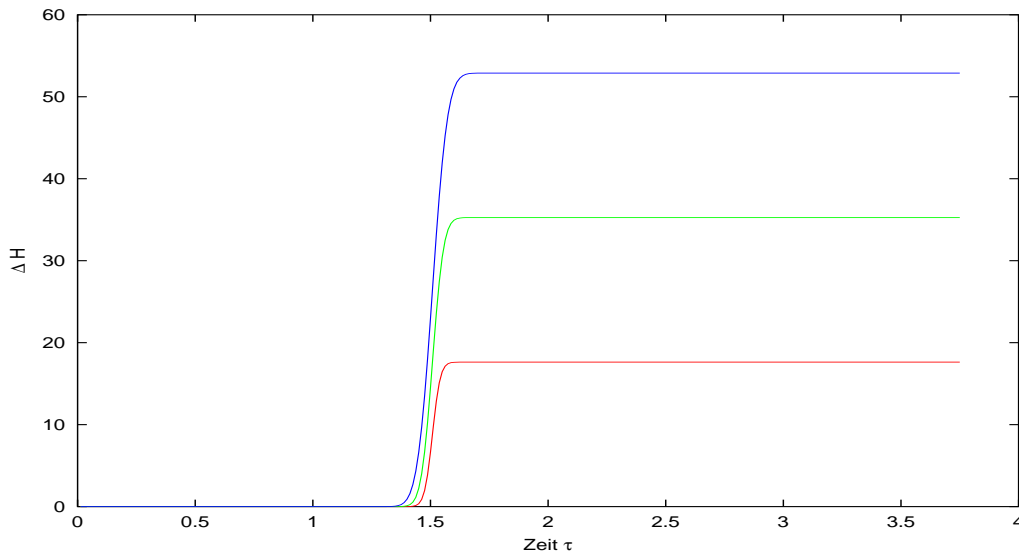


Abbildung 4.2.1-2: Zeitverlauf der integralen Energieänderung $\Delta H(t)$ für unterschiedliche Kopplungsbreiten. $\sigma = 1$ (rot), $\sigma = 2$ (grün), $\sigma = 3$ (blau). Die Doppelkette, bestehend aus zwei identischen Ketten, wurde mit unterschiedlichen Phasen der solitonartigen Strukturen (4.4) angeregt $\delta_1 = \pi/2$ und $\delta_2 = 0$. Der Energieübertrag steigt mit wachsender Kopplungsbreite σ .

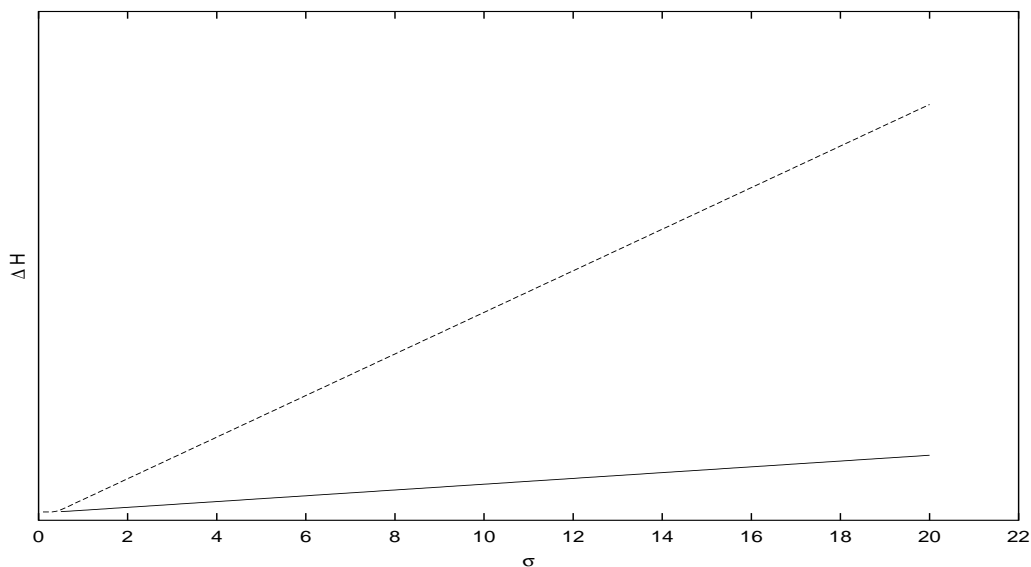


Abbildung 4.2.1-3: Die integrale Energieänderung $\Delta H(T)$ liefert einen anfangs linear steigenden Energieübertrag in Abhängigkeit der Kopplungsbreite σ . Wird der Kopplungsterm $\kappa(n)$ ohne Normierung betrachtet, ist die Steigung erheblich geringer. Hier wurde das Anregungszentrum bei $x_0 = -1000$ gewählt, um auch größere Kopplungsgebiete zu untersuchen.

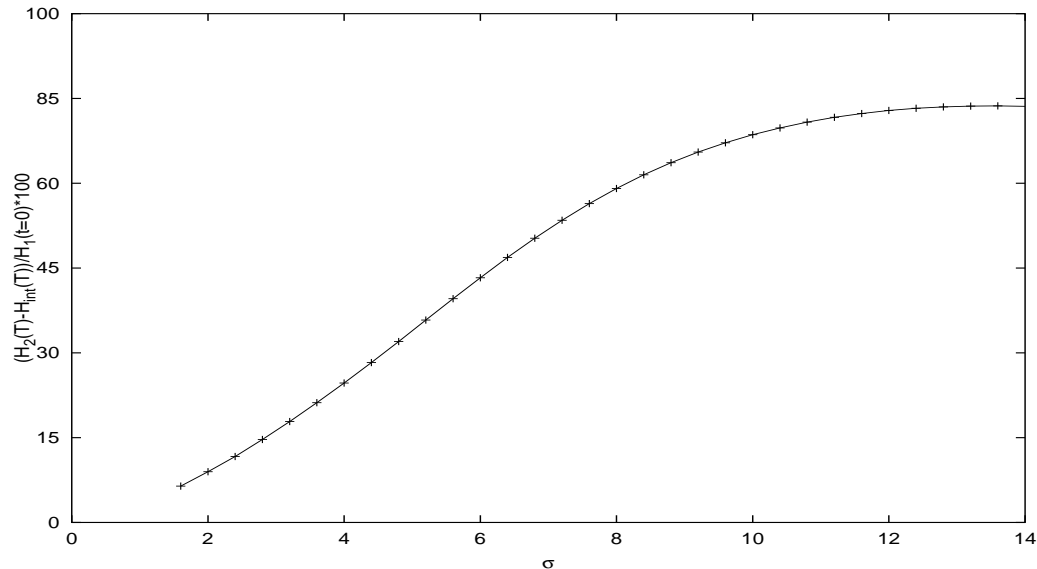


Abbildung 4.2.1-4: Energieübertrag in Anteilen der Anregungsenergie. Die Rechnung basiert auf der Integration der Bewegungsgleichungen eines DST-Doppelkettensystems mit identischen Kettensträngen und unterschiedlichen Kopplungsgebieten. Als Anregungsprofil ist ein homokliner Orbit gewählt. Weitere Parameter: $\kappa_0 = 0.25$, $\omega = -2.3$, $\gamma = 1.1$, $V = 1$.

$\Delta H(\sigma)$ kann natürlich nur bis zu einem Maximalwert ansteigen, bei dem sämtliche Anregungsenergie auf die Nachbarkette übertragen ist. Die Kurve in Abbildung (4.2.1-3) wird demnach für sehr große σ -Werte in einen Grenzwert einmündend Abbildung (4.2.1-4). Dabei spielt der Abstand zwischen Anregungs- und Kopplungszentrum eine Rolle, da dieser σ nach oben begrenzt. Der Ort der Anregung soll ja keine Kopplung (bzw. $\kappa \ll 1$) zur Nachbarkette besitzen.

4.2.2 Einfluß der Phasenverschiebungen δ_i auf ΔH

Werden die Phasen der Solitonansätze gegeneinander verschoben, so ist dies bis zu einem Maximalwert $\Delta\delta = \pi/2$ mit einer Zunahme des Energieübertrags verbunden. Dies zeigt die Abbildung 4.2.2-1 der Zeitentwicklung von ΔH mit variabler Phasendifferenz $\Delta\delta$. Wird die Frequenz ω bei festgehaltener Phase vergrößert, nimmt der Energietransfer ab.

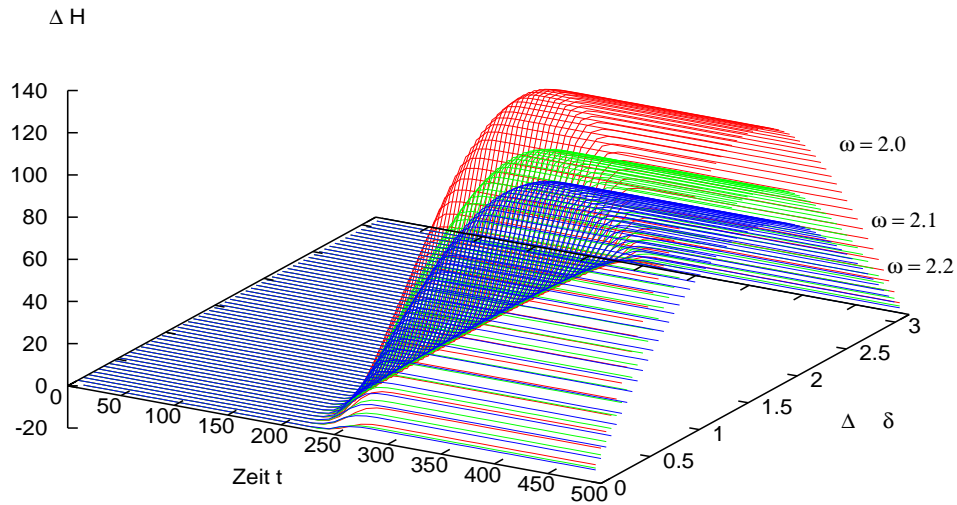


Abbildung 4.2.2-1: Zeitentwicklung der integralen Energieänderung mit variiertem Phasendefizit $\Delta\delta$. Weitere Parameter: $\kappa_0 = 0.2$, $\omega = -2.2$, $\gamma = 1.2$, $V = 1$.

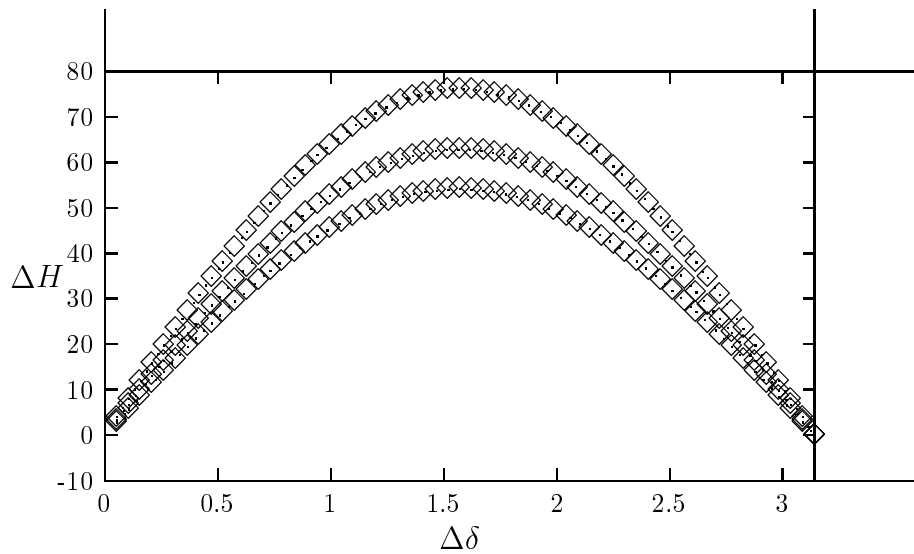


Abbildung 4.2.2-2: Energieübertrag ΔH in Abhängigkeit der Phasenverschiebung $\Delta\delta$ für drei verschiedene ω -Werte. Der maximale Transfer findet bei $\Delta\delta = \pi/2$ statt.

Die Untersuchung des Energietransfers zwischen zwei physikalisch identischen Ketten zeigt eine maximale Energieübertragung für gleiche Frequenzen ω , wenn eine Verschiebung der Schwingungsphasen δ_i von $\pi/2$ vorliegt, d. h. wenn die ψ -Kette angeregt wird, erfährt die energietragende solitonartige Struktur mit Sicherheit eine Veränderung beim Durchgang durch das Kopplungsgebiet. Der approximative Ansatz mit den AL-Solitonen (4.4) muß dies berücksichtigen. Dies kann durch eine Phasendifferenz oder eine Verschiebung der Oszillationen durch Schwerpunktverschiebung ($x_0 \neq y_0$) der Solitonansätze (4.4) realisiert werden.

Wichtig ist nur, daß die Ansätze nicht identisch gewählt werden. Wie die Fitkurven in Abschnitt 4.1 zeigen, hat sich bei der exakten Amplitudensimulation mit einem homoklinen Orbit als Ausgangskonfiguration die Gestalt der Soltionstruktur auf der ϕ -Kette verändert.

Werden die Phasen und sämtliche Solitonparameter sowie die Kettenparameter auf der ψ - und ϕ -Kette identisch angenommen, so ist kein Energietransfer realisierbar. Inwiefern sich die Energietransferdynamik verändert, wenn die Frequenzen und Kopplungsparameter der einzelnen Ketten variieren, ist Gegenstand der folgenden Untersuchungen.

4.3 2.Fall: Berechnung des Energietransfers zwischen unterschiedlichen Ketten

Ausgangspunkt ist wieder Gleichung (4.1).

Der differentielle Energieaustauschterm hat unter Verwendung von (4.6) folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} \{H_1, H_{int}\} = & 2A_\psi A_\phi \sum_n \kappa(n) \left\{ \left[V^\psi \left(\operatorname{sech}(Z_\psi^+) \sin(Y + C_\psi) \right. \right. \right. \\ & \left. \left. + \operatorname{sech}(Z_\psi^-) \sin(Y - C_\psi) \right) + \operatorname{sech}(Z_\psi) \sin(Y) \right. \\ & \left. \left. (\gamma_\psi A_\psi^2 \operatorname{sech}^2(Z_\psi) \sin(Y)) - E_n^\psi \right] \operatorname{sech}(Z_\phi) \right\}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Wie wir gesehen haben, ist die Art der Kopplung zwischen den Ketten von entscheidender Bedeutung für den Energietransfer, wobei sichergestellt sein muß, daß eine lokalisierte Anregung als solitonartige Struktur entlang der Kette bewegt werden kann. Die Voraussetzungen dafür bilden die intrinsischen Nichtlinearitäten innerhalb jeder Kette und die Form der energetischen Anregung.

Wird nun angenommen, daß die Frequenzen der Oszillatoren ω und die Kettenparameter V und γ auf der ψ -Kette sich von denjenigen auf der ϕ -Kette unterscheiden, so ergibt sich ein neues Bild für die Transferdynamik.

Es stellt sich nunmehr die Frage, ob und inwiefern es auch für diesen Fall möglich ist, eine energetische Anregung von einer Kette auf die andere zu übertragen.

Diese Frage ist, wie wir sehen werden, mit *ja* zu beantworten, wenn auch der Transfer nur noch in abgeschwächter Form stattfindet.

Die Parameter Kopplungsbreite σ und Phasendifferenz $\Delta\delta$ stehen auch jetzt bei der Suche nach den Ursachen einer maximierten Energieübertragung im Vordergrund.

Mit $\omega_\psi \neq \omega_\phi$ verändert sich die Zeitabhängigkeit der differentiellen Energieänderung $\frac{dH_1}{dt} = \{H_1, H_{int}\}$, da in (4.12) ein zusätzlicher zeitabhängiger Term zum Tragen kommt. Die dabei auftretende Änderung des differentiellen Energieaustauschs ist in Abbildung 4.3-1 gezeigt.

Die Integration liefert Energieüberträge, die in Abhängigkeit der Kopplungsbreite nur bis zu einem Maximalwert ansteigen, um dann für größere Kopplungsgebiete wieder abzunehmen.

Um einen möglichst großen Energietransfer zu erzielen, muß demnach die Kopplungsbreite so gewählt werden, daß möglichst wenig negative Werte in der Zeitentwicklung des differentiellen Energieaustausches enthalten sind, da sie den Integralwert verkleinern. Abbildung (4.3-2) zeigt die Integration der differentiellen Energieänderung für unterschiedliche Kopplungsbreiten bei einem konstanten Abstand zwischen Anregungs- und Kopplungszentrum von 100 Kettenplätzen.

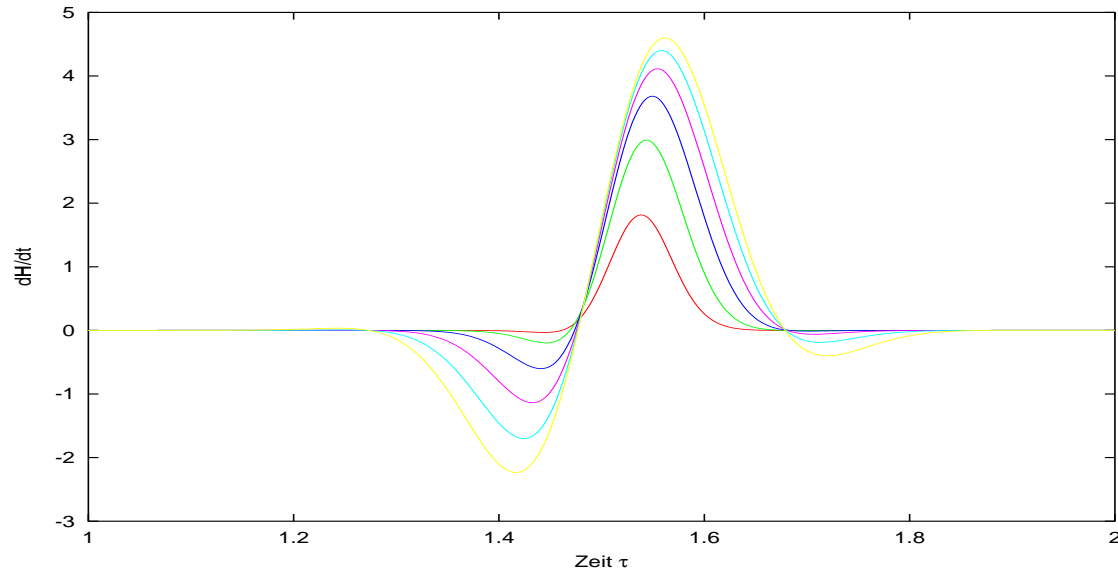


Abbildung 4.3-1: Differentielle Energieänderung dH/dt gemäß (4.12) für unterschiedliche Breiten σ des Kopplungsgebietes: $\sigma = 1$ (rot), $\sigma = 2$ (grün), $\sigma = 3$ (blau), $\sigma = 4$ (violett), $\sigma = 5$ (hellblau), $\sigma = 6$ (gelb). Je breiter das Kopplungsgebiet ist, umso länger ist auch die Wechselwirkungszeit beider Ketten. Durch die neu hinzugekommenen zeitabhängigen Terme im Energieaustausch (4.12) treten jetzt auch negative Werte auf. Die Energie oszilliert im Kopplungsgebiet während des Transfers zwischen den Ketten hin und her.

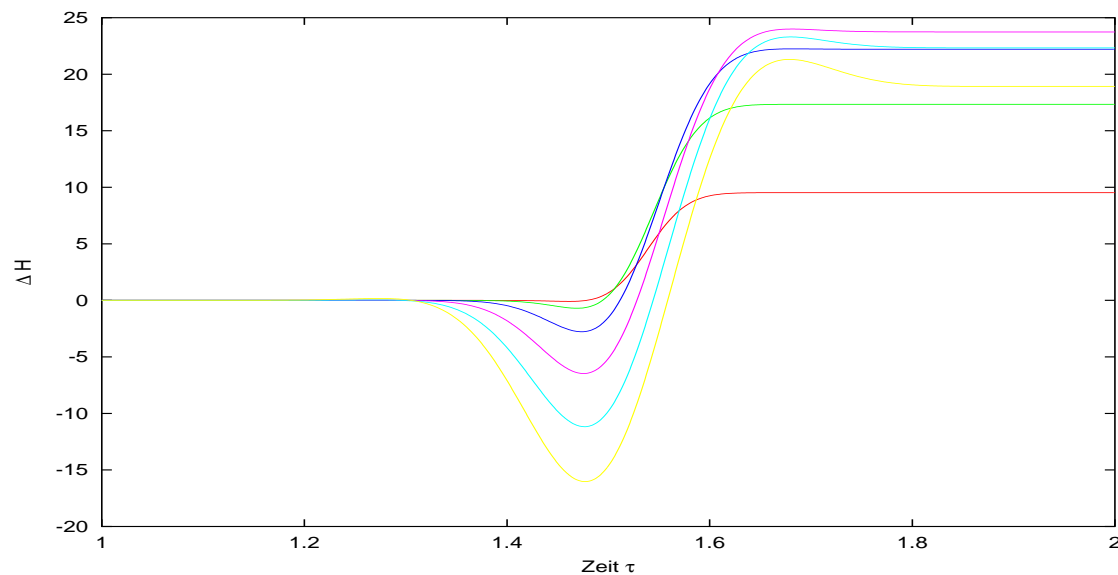


Abbildung 4.3-2: Integration der differentiellen Energieänderung zur Berechnung von ΔH mit unterschiedlichen Kopplungsbreiten: $\sigma = 1$ (rot), $\sigma = 2$ (grün), $\sigma = 3$ (blau), $\sigma = 4$ (violett),

$\sigma = 5$ (hellblau), $\sigma = 6$ (gelb). Die integrale Energieänderung steigt nicht mehr monoton mit σ . Es existiert ein bestimmtes Kopplungsgebiet mit $\sigma_{max} = 4$, welches die Energieübertragung maximiert.

Die Kopplung muß gerade so gewählt werden, daß ein großer positiver Bereich des differentiellen Energieaustausches zur Integration beiträgt. Es kann gezeigt werden, daß bei festgehaltenen Systemparametern ein σ -Wert existiert, der zu einem Maximum der integralen Energieänderung $\Delta H(\sigma)$ führt. Das steht im Gegensatz zu den in Abschnitt 4.2 hergeleiteten Zusammenhängen zwischen ΔH und σ .

Die Berechnung von $\Delta H(t)$ für verschiedene Kopplungsbreiten (Abb. 4.3-2) zeigt, daß das Zwischenergebnis aus dem vorherigen Abschnitt: "Mehr Kopplung verursacht größeren Energietransfer, bei Zunahme der Kopplungsenergie", jetzt *keine* Gültigkeit mehr hat.

Vielmehr steigt der Energieübertrag mit wachsender Kopplungsbreite σ bis zu einem Extremalwert an, um danach, trotz zunehmender Kopplung wieder kleiner zu werden.

Betrachtet man die Ableitung von (4.11) nach σ , so bestätigt sich dieses Systemverhalten:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\sigma} \Delta H(T, \sigma) &= \int_T dt \frac{d}{d\sigma} \{H_1, H_{int}\} \\ &= 2A_\psi^2 \int_T dt \sum_n \frac{(n - n_0)^2}{\sigma^3} \kappa(n) \mathcal{P}(n, t), \end{aligned} \quad (4.13)$$

mit:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(n, t) &= \operatorname{sech}(Z) \left[V^\psi \left(\operatorname{sech}(Z^+) \sin(C_\psi + \Delta\delta) + \operatorname{sech}(Z^-) \sin(-C_\psi + \Delta\delta) \right) \right. \\ &\quad \left. + \operatorname{sech}(Z) \sin(\Delta\delta) (\gamma A_\psi^2 \operatorname{sech}^2(Z) - E_n) \right]. \end{aligned}$$

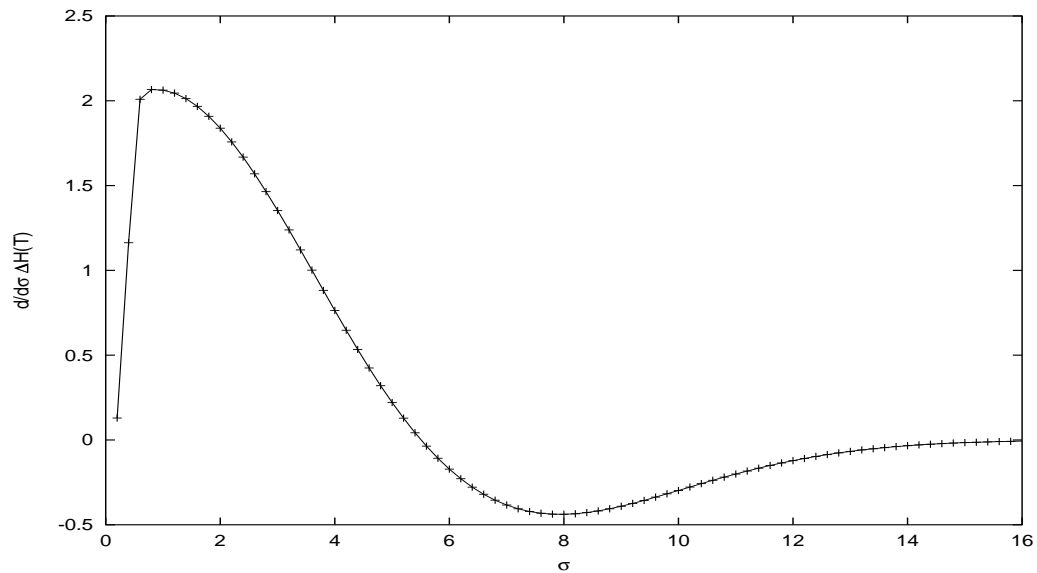


Abbildung 4.3-3: Ableitung der Integralen Energieänderung für verschiedene Kopplungsbreiten σ . Signifikant ist die Existenz einer Nullstelle. Weitere Parameter: $\Delta\omega = 0.1$, $V^\psi = 1$, $V^\phi = 1.1$, $\gamma = 1.2$, $C_i = 0.4$, $\kappa_0 = 0.2$

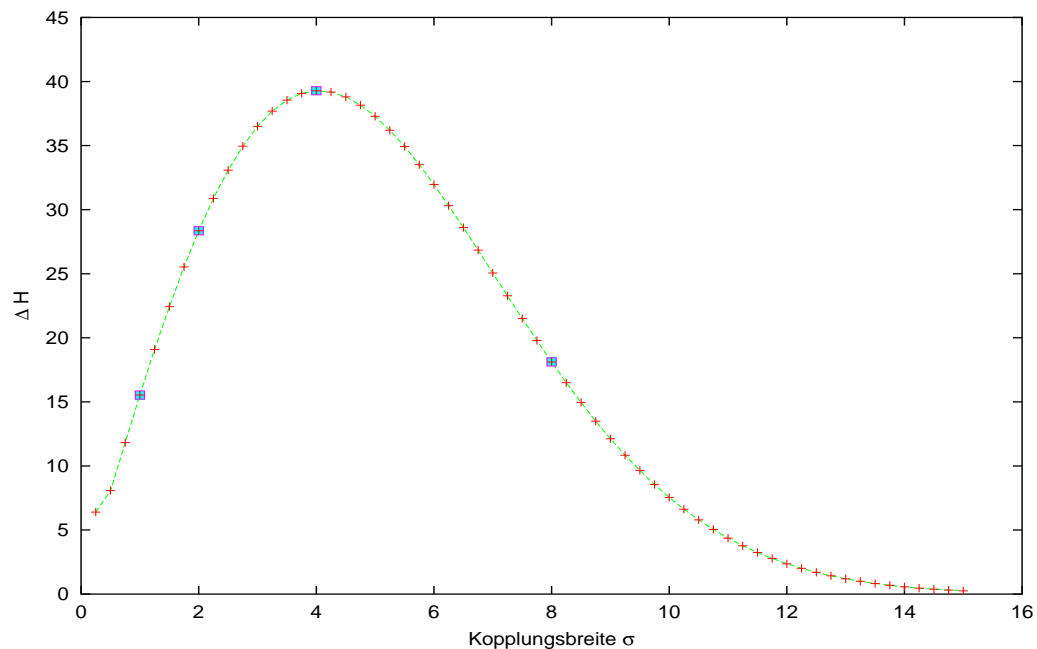


Abbildung 4.3-4: Integrale Energieänderung gemäß (4.11) für verschiedene Kopplungsbreiten σ . Die Integralwerte zu den Kopplungsbreiten $\sigma = 1, 2, 4, 8$ sind als Quadrate gekennzeichnet. Signifikant ist die Existenz eines Maximums. Weitere Parameter: $\Delta\omega = 0.1$, $V^\psi = 0.8$, $V^\phi = 0.96$, $\gamma = 1.2$, $C_i = 0.4$, $\kappa_0 = 0.2$

Es sei daran erinnert, daß dieses Verhalten des Systems eine Folge der Verwendung einer Ablowitz-Ladik-Lösung als Fitfunktion bei der Berechnung von ΔH ist.

Eine Bestätigung dieser qualitativen σ -Abhängigkeit gibt die weitaus aufwendigere numerische Simulation der Amplitudendynamik durch direkte Integration der Bewegungsgleichungen mit unterschiedlich gestalteten Kopplungsgebieten (Abbildung 4.3-5). Für große Kopplungsbreiten geht diese Kurve jedoch nicht gegen Null, sondern nähert sich einem konstanten Wert. Hier zeigt sich, daß die Berechnung der integralen Energieänderung ΔH das reale Systemverhalten nicht gänzlich wiedergeben kann.

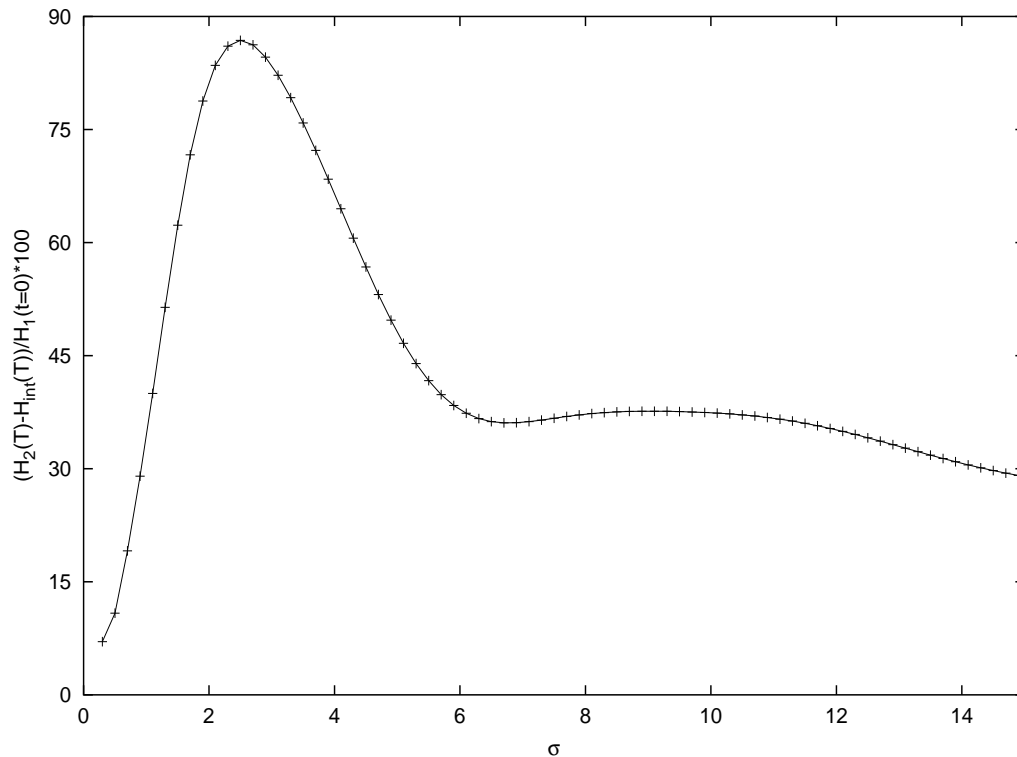


Abbildung 4.3-5: Energieübertrag in Anteilen der Anregungsenergie. Zur Berechnung wurden die Bewegungsgleichungen für unterschiedliche Kopplungsgebiete integriert. Die direkte Simulation der Amplitudendynamik bestätigt die Existenz einer "optimalen" Kopplungsbreite σ . Es werden annähernd 90% der Anregungsenergie übertragen, wenn $\sigma = 2.5$ beträgt. Für große σ nähert sich die Energieübertragung einem konstanten Wert von ca. 30%. Weitere Parameter: $V^\psi = 1$, $V^\phi = 1.2$, $\gamma = 1.2$, $C_i = 0.4$, $\kappa_0 = 0.25$.

Dieses Ergebnis macht es möglich, mit einer kleinen Variation der Anzahl der Kopplungsbrücken, also einer Veränderung der Breite des Kopplungsgebietes, den Energietransfer zwischen den Ketten erheblich zu beeinflussen. Die Steuerung des kompletten Energietransfers ist mittels einer kleinen Anzahl veränderlicher Kopplungen möglich.

4.3.1 Die Gruppengeschwindigkeit der Solitonstruktur

Am Beispiel der GDNLS-Doppelkette wird die Gruppengeschwindigkeit der energietragenden Solitonstruktur eingeführt.

Ausgangspunkt sind die vereinfachten Bewegungsgleichungen des GDNLS-Systems (3.5). Wir suchen nach oszillierenden Lösungen durch den Ansatz, der, wie oben besprochen, für die Ablowitz-Ladik-Kette auf eine exakte Lösung führt:

$$\begin{aligned}\psi_n(t) &= \Psi_n \exp(-i(\omega t - \alpha n + \delta)), \\ \phi_n(t) &= \Phi_n \exp(-i(\omega t - \alpha n + \delta)).\end{aligned}$$

Ψ_n und Φ_n sind reelle Amplituden. Es ist ausreichend, nur die Geschwindigkeit auf der ψ -Kette zu betrachten, da die Geschwindigkeit der Solitonstruktur auf der angeregten Kette bis zum Erreichen des Kopplungsgebietes untersucht werden soll. Mit welcher Geschwindigkeit die Solitonstruktur nach dem Wechselwirkungsgebiet auf der zweiten Kette weiterläuft, ist für den Energieübertragungsprozeß nicht mehr von Bedeutung.

Wird der Ansatz in die Gleichung der ψ -Kette eingesetzt, so erhält man aus dem Realteil eine Dispersionsbeziehung zwischen ω und der, als Wellenvektor aufzufassenden Ausbreitungsrichtung α . In [3] ist ein einzelner Kettenstrang untersucht worden. Hier ist das Ergebnis für das Doppelkettensystem:

$$\begin{aligned}\omega &= -V^\psi \left(2 \cos(\alpha) + \mu \cos(\alpha) \frac{\sum_n (\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1}) \Psi_n^2}{\sum_n \Psi_n} \right. \\ &\quad \left. + \gamma \frac{\sum_n \Psi_n^3}{\sum_n \Psi_n} \right) - \kappa(n) \frac{\sum_n (1 + \mu \Psi_n^2) \Phi_n}{\sum_n \Psi_n}.\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich eine (formal zeitabhängige) Gruppengeschwindigkeit:

$$\frac{d\omega}{d\alpha} = v_g(\alpha, t) = V^\psi \left(2 \sin(\alpha) + \mu \sin(\alpha) \frac{\sum_n (\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1}) \Psi_n^2}{\sum_n \Psi_n} \right)$$

die mit kleiner Amplitude um einen konstanten Wert oszilliert. Der Wert der zeitgemittelten Geschwindigkeit $\bar{v}_g(\alpha, t)$ stimmt gut mit dem Wert überein, der sich aus den Amplitudensimulationen ergibt. Es kann vorkommen, daß zu bestimmten Zeitpunkten die Summe der negativen und positiven Amplituden im Nenner fast verschwindet, was zu Unstetigkeitsstellen in $v_g(\alpha, t)$ führt.

4.3.2 Zusammenhang zwischen integraler Energieänderung, Kopplungsgebiet und Gruppengeschwindigkeit

Im Abschnitt 4.2.1 sahen wir, daß der Energieaustausch groß wird, wenn zum integralen Energietransfer möglichst wenig negative Beiträge der differentiellen Energieänderung beitragen. Wie ist dies zu beeinflussen?

Wird die differentielle Energieänderung für ein sehr großes σ betrachtet, dann erkennt man für den Fall unterschiedlicher Ketten eine Oszillation der Anregungsenergie zwischen ψ - und ϕ -Kette (Abbildung 4.3.2-1). Die Frequenz F dieser Oszillation ist gemäß dH/dt (4.5) durch die Differenz $\omega^\psi - \omega^\phi = \Delta\omega$ festgelegt und ergibt sich zu:

$$F_{dH_1/dt} = \frac{\Delta\omega}{2\pi} \quad \text{mit der Periode} \quad T_{dH_1/dt} = \frac{2\pi}{\Delta\omega} = F_{dH_1/dt}^{-1}.$$

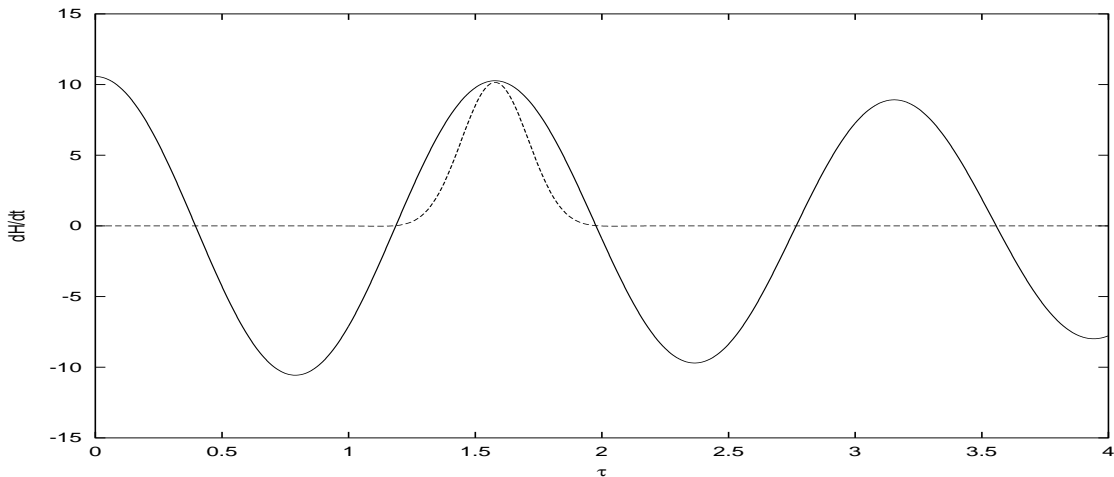


Abbildung 4.3.2-1: Oszillation der Energieänderung bei sehr großen σ -Werten, die eine komplett verbrückte Doppelkette repräsentieren. Wird $\sigma = 10$ gewählt, so steuert nur ein Ausschnitt der Oszillation zur integralen Energieänderung bei (- - -). Die Oszillation wird hier von einer Frequenzdifferenz $\Delta\omega = 0.05$ hervorgerufen.

Nach einer Periode $T_{dH_1/dt}$ ist die Solitonstruktur einmal von der ψ -Kette zur ϕ -Kette und wieder zurück transferiert. Mit anderen Worten, sind Geschwindigkeit und Kopplungsgebiet so beschaffen, daß die Wechselwirkungszeit, d. h. die vom Anregungsprofil zum Durchlaufen des Kopplungsgebietes benötigte Zeit, genau eine Halbperiode $T_{dH_1/dt}/2$ beträgt (oder ein ungerades Vielfaches davon), dann ist die integrale Energieänderung am größten.

Es kann jetzt eine Bedingung für einen maximierten Energietransfer formuliert werden, die die wichtigsten Parameter des nichtlinearen Doppelkettensystems miteinander verknüpft:

$$v_g(\alpha) T_{dH_1/dt}(\Delta\omega) = 2 S \sigma. \quad (4.14)$$

S ist eine Konstante, die den Rand der gaußverteilten Kopplungsstärke festlegt. Im Abstand $S/2$ links und rechts vom Kopplungszentrum liegen die Grenzen des wirksamen Kopplungsgebietes. Ist der Wert von κ kleiner als ca. $\frac{1}{100}V^\psi$, so spürt die Solitonstruktur de facto nichts mehr von der Kopplung zur Nachbarkette. Da der Übergang fließend ist, läßt sich ein exakter Wert für S nicht angeben. Es hat sich jedoch in den Amplitudensimulationen gezeigt, daß $S = 6$ einen guten Wert für gaußverteilte Kopplungsstärken ohne Normierung darstellt, da $\kappa(n)$ mit $\sigma = 1$, $n_0 = 0$ und Skalierung Eins bei $n = 3$ gerade 0.01 ist.

Besteht das Kopplungsgebiet aus einer festen Anzahl l von Kopplungsbrücken mit konstanter Kopplungsstärke κ_0 , so ist in (4.14) $S = 1$ und $\sigma = l$ zu wählen.

4.3.3 Zusammenhang zwischen Frequenzdifferenz und Kopplungsbreite bei Maximierung des Energieübertrags

Die Frequenzdifferenz $\Delta\omega$ beider Ketten ist eine entscheidende Größe hinsichtlich der Energieübertragung. Je größer die Frequenzdifferenz, umso schwieriger ist Energietransfer zu realisieren, da die Abhängigkeit des Energietransfers von den Systemparametern Kopplungsbreite σ und Geschwindigkeit v_g der Solitonstruktur durch die immer hochfrequenter werdende Oszillation der differentiellen Energieänderung immer sensibler wird.

Sei eine feste Frequenzdifferenz vorgegeben, die beispielsweise aufgrund von energetischen Atom- oder Moleküleigenschaften zustande kommt und auf diese Weise in das Modell einfließt, dann stellt sich die Frage, welche Kopplungsbreite den Energietransfer zwischen den Ketten optimiert. Die Existenz eines optimalen Kopplungsparameters für unterschiedliche Frequenzen wurde bereits in den vorigen Abschnitten gezeigt.

Nun gilt es, für jeden Frequenzunterschied die transferierte Energie zu berechnen. Diese Rechnungen werden zusätzlich für unterschiedliche Kopplungsbreiten durchgeführt, um ein optimales Wertepaar $(\Delta\omega, \sigma)$ aufzufinden. Weiterhin werden die Verteilung der Anregungsenergie und die Größe der Nichtlinearitätsparameter so gewählt, daß über den gesamten Wertebereich der Kopplungsbreiten und Frequenzdifferenzen ein annähernd stabiler Transport lokalisierter Anregungsenergie gewährleistet ist. Für jede Frequenzdifferenz $\Delta\omega$ wird der Kopplungsparameter σ bestimmt, der den Energietransfer maximiert.

Das Ergebnis ist in Abbildung (4.3.3-1) dargestellt.

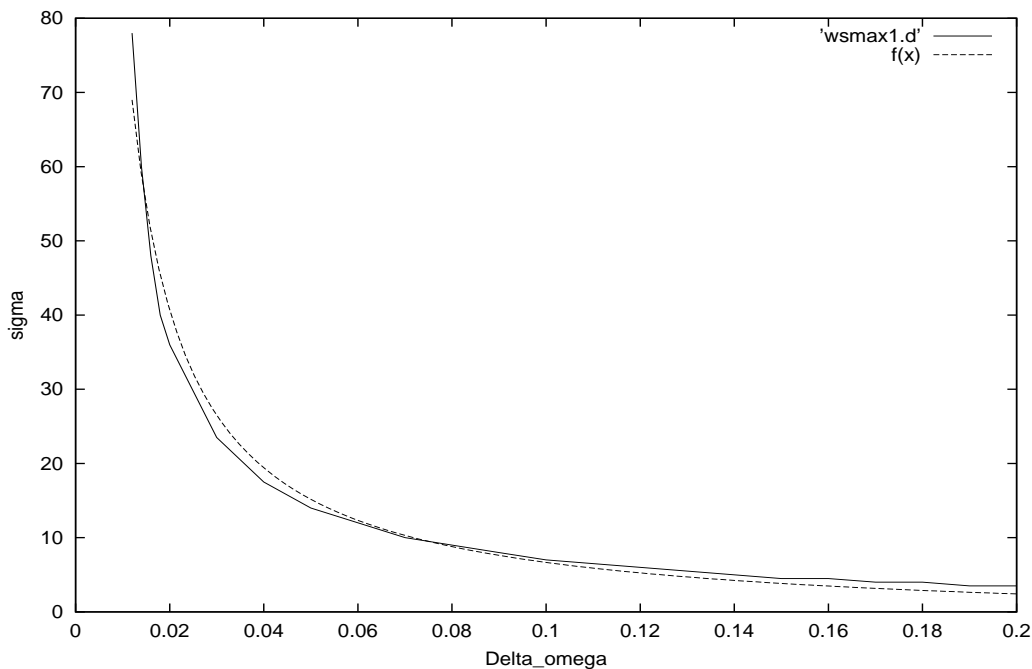


Abbildung 4.3.3-1: Kopplungsbreite in Abhängigkeit der Frequenzdifferenz für gleichzeitig maximierten Energietransfer. Die Fitfunktion zeigt eine umgekehrte Proportionalität zwischen σ und $\Delta\omega$: $\sigma = f(\Delta\omega) \propto 1/\Delta\omega$. Zur Berechnung wurde die direkte Amplitudensimulation (Integration der Bewegungsgleichungen) benutzt.

Man erkennt, daß die Frequenzdifferenz und die Kopplungsbreite des Kopplungsgebietes in einem umgekehrt proportionalen Zusammenhang stehen. Dies kann mit Hilfe einer Fitfunktion als Potenzgesetz formuliert werden:

$$\sigma = f(\Delta\omega) = \text{const}_1 \cdot (\Delta\omega)^{-p} + \text{const}_2, \quad \text{wobei hier gilt: } p = -1. \quad (4.15)$$

Für die Fitfunktion in Abbildung (4.3.3-1) wurden folgende Konstanten ermittelt: $\text{const}_1 = 0,85$, $\text{const}_2 = -1,83$.

Die Konstanten der Fitfunktion sind dabei quantitativ abhängig von der Wahl der Anfangsanregung und der übrigen Systemparameter. Der qualitative Zusammenhang zwischen Frequenzdifferenz und Kopplungsbreite ist davon jedoch unabhängig. Das Potenzgesetz (4.15) gilt also universell für beliebige Wahl der übrigen Systemparameter, die einen lokalisierten Energietransfer ermöglichen.

4.3.4 Vergleich der Ergebnisse mit den Amplitudensimulationen der diskreten Kopplung

In Kapitel 3 wurde die Amplitudendynamik einer Doppelkette mit diskreten Kopplungsgebieten verschiedener Breite und Kopplungsstärke simuliert (Abschnitt 3.2). Die Ergebnisse zeigen den gleichen qualitativen Zusammenhang zwischen integraler Energieänderung und Breite des Kopplungsgebietes wie im Falle der kontinuierlichen Kopplung.

Die kontinuierliche Kopplung in Form einer Gaußfunktion, die jedem Kettenplatz eine bestimmte Kopplungsstärke zuordnet ($\kappa(n)$), ist eine gute Möglichkeit, eine bestimmte, feste Anzahl von Kopplungsbrücken zwischen zwei Kettensträngen durch geeignete σ -Werte zu simulieren. Für die Energieübertragung ist es dabei unerheblich, ob sich an den Rändern des Kopplungsgebietes die Kopplungsstärke plötzlich oder kontinuierlich verändert.

Mit der gaußverteilten Kopplungsstärke $\kappa(n)$ und den Ablowitz-Ladik-Fitfunktionen eröffnet sich ein kompakter analytischer Zugang zur Berechnung der integralen Energieänderung ΔH . Damit ist es möglich, den Einfluß anderer Systemparameter auf den Energietransfer zu untersuchen. Die Differenz der Oszillatorfrequenzen, die Pha-

sendifferenz und die Solitongeschwindigkeit spielen dabei, neben der Suche nach einer lokalisierten, zeitlich stabilen Anfangskonfiguration eine wichtige Rolle.

Die qualitativen Ergebnisse sind unabhängig von der benutzten Diskretisierung (Ablowitz-Ladik-, DST- oder GDNLS-Diskretisierung) der nichtlinearen Schrödingergleichung.