66-72

有机蛋白质分子中激发的孤子的喇曼散射效应

庞小峰
(中国科学院国际材料物理中心,辽宁,沈阳,110015;西南民族学院物理系,四川,成都,610041)

许长谭
(山东省临沂教育学院物理系,山东,临沂,276001)

Q510.2

A

摘要 利用对孤子哈密顿量的部分对角化研究了有机蛋白质分子中激发孤子导致的喇曼散射特点,求出喇曼散射的跃迁几率和微分截面的表达式,得到了与实验值相吻合的和与喇曼散射斯塔克分量相关的红移值.

(13)

关键词 孤子,喇曼散射,跃迁几率,微分散射截面,红移,蛋白质.

引言

Davydov提出的生物能量传递理论存在许多问题[2~5]. 我们提出的新理论[6~10]中的哈密顿量和波函数不同于Davydov[1]和Takeno[5]的表达式. 我们的结果与实验值吻合,孤子是热稳定的,其寿命在310K时高10^{-8}s. 在这段时间内孤子可运动过10^4个氨基酸残基,能承担起传递生物能量的生物功能,因而在生物学中极其有价值[6~10]. 本文研究由这类孤子导致的喇曼散射效应.

人们已从蛋白质和有机固体acetanilide的红外吸收谱和喇曼散射谱中观察到新amide-I带和从主峰$1665cm^{-1}$的$15cm^{-1}$的红移[2,3,6~10],这表明系统中存在孤子激发,此红移与该系统激发的孤子与激子之间的能隙所导致散射的喇曼的stokes分量值直接相关,因此,研究孤子的喇曼散射特征有助于了解和澄清蛋白质中激发的孤子的本质和特征. 本文从我们的量子化哈密顿量导出孤子的方程和解,并对量子哈密顿量部分对角化计算出孤子与激子间的能隙,与实验红移值吻合. 还计算了喇曼散射的跃迁几率和微分散射截面表示式及喇曼散射特点. 通过与实验值比较的一致性表明我们的理论分析是正确的,即孤子存在于此系统中.

1 孤子的运动方程和相应哈密顿函数的部分对角化

根据我们的理论[6~10],在蛋白质分子中由ATP水解作用释放能量导致的分子内部的局域性激发和分子链构象畸变而引起的集体激发所对应的哈密顿量H和波函数Φ在二次量子化表象中可表示为:

本文1995年6月9日收到,修改稿1995年10月9日收到

$$H = \sum_i \varepsilon_0 (b_i^+ b_i + \frac{1}{2}) - J \sum_i (b_i^+ b_{i+1} + b_i b_{i+1}^+)$$
$$+ \sum_q \hbar\,\omega (a_q^+ a_q + \frac{1}{2}) + \sum_i \sum_q [g(q)(b_i^+ b_i + b_i b_i^+)$$
$$+ g_1(q)(b_i^+ b_{i+1} + b_i b_{i+1}^+)](a_q + a_{-q}^+)\exp\{jir_0 q\}, \tag{1}$$

$$|\Phi\rangle = |\varphi\rangle U(t)|0\rangle_{ph} = (\frac{1}{\lambda'}(1 + \sum_i \varphi_i(t) b_i^+))|0\rangle_{ex}$$
$$\exp\{\sum_q [a_q(t) a_q^+ - a_{-q}^*(t) a_q]\}. \tag{2}$$

式(1)和(2)中各项的定义见文献[6]～[10]. 在低频振动下，采用长波近似和连续性近似，由式(1)和(2)可得此类问题的孤子解为[11~12]

$$\varphi(x,t) = (\frac{\mu r_0}{2})^{1/2}\mathrm{sech}(\mu(x - x_0 - vt))\exp[j(\frac{\hbar\,v}{2Jr_0^2}(x - x_0) - E_{sol}t/\hbar)], \tag{3}$$

$$a_q(t) = \Big[\frac{j\,\hbar\,(\chi_1 + \chi_2)M(\omega q + vq)}{4MV_0^2\omega_0(1 - s^2)\hbar\,N\omega_q sh(\pi r_0 q/2\mu)}\Big]e^{jqx} = f_q\exp(jqvt), \tag{4}$$

其中，$\mu = \frac{G}{4Jr_0^2}$，$G = \frac{\hbar^2 r_0^2(\chi_1+\chi_2)^2}{MV_0^2\omega_0^2(1-s^2)}$，$s = V/V_0$，$V_0 = (\beta/M)^{1/2} r_0$，所激发的孤子的能量可以求得为[11,12]

$$E_{sol} = \int H \frac{d\xi}{r_0} = \varepsilon_0 - 2J + \frac{\hbar^2 v^2}{4Jr_0^2} - \frac{1}{3}\mu^2 J = E_0 + \frac{1}{2}M_{sol}V^2. \tag{5}$$

其中
$$E_0 = \varepsilon_0 - 2J - \frac{\hbar^4(\chi_1 + \chi_2)^4}{48\beta^2 J\omega_0^4},$$
$$M_{sol} = m + \frac{\hbar^4(\chi_1 + \chi_2)^4(1 - \frac{3}{2}s^2 - \frac{1}{2}s^4)}{48\beta^2 J\omega_0^4 v_0^2(1 - s^2)^3} > m. \tag{6}$$

由此看到激发的孤子质量大于激子，但静止能量却小于激子的静止能量约为$\frac{\hbar^4(\chi_1+\chi_2)^4}{3\beta J\omega_0^4}$. 根据能量极小的稳定条件，由于孤子能量低于激子导带底部值，所以这类孤子是稳定的.

为了对角化哈密顿量式(1)，我们将它转化到以速度 V 运动的参考系中，为此作变换[13]

$$\overline{H} = H - I\sum_k \hbar\,kv(b_k^+ b_k + a_k a_k), \quad b_k^+ = N^{-\frac{1}{2}}\sum_i \exp(jir_0 k) b_i^+. \tag{7}$$

由于所激发的孤子相关于分子链的畸变，为此还须作变换 $A_q^+ = a_q^+ - N^{-\frac{1}{2}} f_q^*$，$A_q = a_q - N^{-\frac{1}{2}} f_q$. 将式(7)转变为考虑这种畸变的新声子态中，这里 $A_q^+(A_q)$就是新声子的产生(湮灭)算符，相应的新声子的真空态为 $|0\rangle_{ph} = \exp[(a_q a_{-q}^+ - a_{-q}^* a_q)]|0\rangle_{ph}$，即 $A_q|\tilde{o}\rangle_{ph} = 0$.

所谓部分对角化就是在式(7)中不含有新声子算符的那部分的对角化，为此我们作正则变换[8~10]$B_\lambda^+ = \sum_i (1 + \varphi_\lambda(t) b_i^+)$，$B_\lambda = (B_\lambda^+)^+$，$\sum_i \varphi_\lambda^*(i)\varphi_{\lambda'}(i) = \delta_{\lambda\lambda'}$，$\sum_\lambda \varphi_\lambda^*(i)\varphi_\lambda(i') = \delta_{ii'}$. 这里 $\varphi_\lambda(i)$ 在连续性近似下必须满足具有本征值 E_λ 的本征方程式$(-J\frac{\partial^2}{\partial x^2} - j\,\hbar v\frac{\partial}{\partial x} - 2\mu^2 Jr_0^2\mathrm{sech}^2(\frac{1}{r_0}\mu x) + \varepsilon_0 - 2J_0)\varphi(i/\lambda) = E\lambda\varphi(i/\lambda)$，在满足自然边界条件下，它有唯一的束缚态解

$$\varphi(i/\lambda) = (\frac{\mu r_0}{2})^{1/2}\mathrm{sech}(\mu_i)e^{j\hbar v i/2Jr_0^2}. \tag{8}$$

它所对应的能量为

$$E_s = \varepsilon_0 - 2J - \frac{\hbar^2V^2}{4Jr_0^2} - \mu^2 J, \tag{9}$$

同时也存在一个非束缚的扩展态解

$$\varphi(i/\lambda) = \left[\frac{(\mu r_0 th(\mu i) - jkr_0)}{\sqrt{2\pi}(\mu - jkr_0)}\right]\exp\left[j(\frac{\hbar v}{2Jr_0^2} + kr_0)i\right]. \tag{10}$$

相对应的色散关系为

$$E_k = \varepsilon_0 - 2J - \frac{\hbar^2 v^2}{2Jr_0{}^2} + (kr_0)^2 J. \tag{11}$$

显然 $\varphi(i/\lambda)$是归一化的. 因此 B_k^+ 就是产生一个束缚的激子态的产生算符,B_s^+ 则是晶格畸变时产生局域性孤子的产生算符.

以上是连续性近似下的表示. 但我们可将它们作分立描述. 在此情况下,式(7)的部分对角化表示为

$$\begin{aligned}\overline{H} =& (\varepsilon_0 - 2J - \frac{\hbar^2v^2}{2Jr_0{}^2} - \frac{G^2}{48J}) + E_S B_S{}^+ B_S + \sum_k E_k B_k^+ + \sum_q \hbar\,(\omega_q - vq)A_q^+ A_q \\ &+ \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_q \hbar\,(\omega_q - vq)B_S{}^+ B_S(A_q^+ f_q + A_q f_q^*) \\ &+ \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{q,k} F(k,q)(B_{k+q}^+ B_k + 1)(A_{-q}^+ + A_q) \\ &+ \frac{1}{N}\sum_{k,q}\tilde{F}(k,q)(B_s^+ B_{-k} + B_k^+ B_s + 1)(A_{-q}^+ + A_q),\end{aligned} \tag{12}$$

这里$\tilde{F}(k,q) = \dfrac{jr_0 gJ\pi\,\hbar}{\omega_q(G+4Jr_0 jk)}\left(\dfrac{\hbar J}{\omega_0 M\omega_q}\right)^{\frac{1}{2}}[\chi_1(e^{jr_0q} - e^{-jr_0q}) + \chi_2(e^{jr_0q} - 1)]\mathrm{sech}\left[\dfrac{2\pi r_0 J(q-k)}{G}\right]$,

$$F(k,q) = \left(\frac{1}{32M\omega_0\omega_q}\right)^{\frac{1}{2}}[\chi_1(e^{jr_0q} - e^{-jr_0q}) + \chi_2(e^{jr_0q} - 1)]$$
$$\left[\frac{G^2 - 4jGJ(k+3q)r_0 + 4(k+q)r_0{}^2J^2}{G^2 - 4jGJ(k+2q)r_0 + 4(k+q)r_0{}^2J^2}\right],$$

它们分别是束缚态(孤子)和非束缚态(激子)与新声子的耦合常数.

从式(8)~(11)可知系统中出现的孤子的能量低于激子态的最低能量($k=0$)大约 $\mu^2J/3$. 这正好就是孤子的形成能. 这就是说,在有机蛋白质的畸变分子链中可能出现两种类型的分子内部激发——激子与孤子. 而孤子刚好就是激子与畸变分子链相互作用自陷而成的动力学稳定实体(耦合体). 由于激子的自陷效应,系统的能量降低了 $2\mu^2J/3$,它刚好就是分子链的畸变能 $W = \frac{1}{N}\sum_q \hbar(\omega_q - v_q)|f_q|^2 = 2\mu^2J/3$,这样,孤子的能量便低于激子最低能量 $\mu^2J/3$. 也就是说,此系统中的激子和孤子的能谱之间存在 $\mu^2J/3$ 的能隙. 于是在有机蛋白质和有机固体 acetanilde 的喇曼散射谱中会出现 Stokes 分量的红移,即出现由 amide-Ⅰ振子产生的喇曼主峰 1665cm^{-1}的 15cm^{-1}的红移,后者已在实验中被证实[3,8~10],其红移值恰好

是孤子的形成能. 如果我们利用蛋白质分子的物理参数值[1~10]：$J=1.55\times10^{-22}J$，$\beta=13N/m$，$\chi=\frac{\hbar\chi_1}{2\omega_0}=62PN$、$\chi'=\frac{\hbar\chi_2}{2\omega_0}=6PN$、$\omega_0=4\times10^{14}\mathrm{s}^{-1}$、$\omega_1=6\times10^{13}\mathrm{s}^{-1}$和 $r_0=(3\sim5)$ Å，由公式 $\mu^2J/3$ 可求出孤子的形成能 $E_{sol}=13.74\mathrm{cm}^{-1}$，与实验测定的红移值 $15\mathrm{cm}^{-1}$基本吻合. 这一结果一方面证实喇曼散射谱的红移确由形成的孤子引起，另一方面也表明这类孤子真实存在于蛋白质中，即我们的理论是可信的.

2　喇曼散射的跃迁几率和微分散射截面积的计算

我们认为这类喇曼散射是通过与孤子相关的分子链中的一个中间态如电子激发态来实现的，后者的哈密顿量为 $He=\sum_{k,n}\varepsilon_n(k)D_{kn}^+D_{kn}$，其中 $D_{kn}^+(D_{kn})$是具有能量为 $\varepsilon_n(k)$的电子激发态的产生(湮灭)算符. 入射到体积 $V'=Nr_0S'$ 中的光所对应的哈密顿量为 $H_{op}=\sum_{Q,\delta}\hbar\omega_{Q\delta}C_{Q\delta}^+C_{Q\delta}$，$C_{Q\delta}^+(C_{Q\delta})$是具有能量为 $\hbar\omega_Q$ 和单位极化矢量 $\vec{e}(Q)$的光子的产生(湮灭)算符. 根据这种喇曼散射模型和式(12)的特点，我们将在孤子和电子激发态与导致喇曼散射的光波之间的相互作用. 用哈密顿量表示为

$$H_{int}=\frac{1}{N}\sum_{k}\sum_{k'}Xnn'^{(q)}D_{k-q},nD_{k',n'}B_{k-q}^+B_{k'}+\frac{1}{N}\sum_{k}\sum_{k',q}\tilde{X}_{nn'}^{(q)}D_{k',n}^+D_{k+q,n'}\cdot$$
$$(B_s+B_{k+q}^++B_{k+q}B_s^+)+\sqrt{N}\sum_{Q\sigma}\sum_{n}U_{\sigma n}(Q)(C_{Q\sigma}^+C_{-Q\sigma})(D_{Q\sigma n}^+-D_{-Q\sigma n}),\qquad(13)$$

这里我们考虑了孤子与电子激发态之间的相互作用，其中 X 和 $\tilde{X}$ 是激子与孤子同电子激发态之间相互作用系数，$U_{\sigma n}(Q)$是电子激发态和光波之间相互作用常数，它可以表示为

$$U_{\sigma n}(Q)=-j\varepsilon_n(0)(2\pi/\hbar\,\omega_Q v)^{1/2}(\vec{e}_Q(Q)\cdot\vec{d}_n),\qquad(14)$$

这里 $\vec{d}_n$ 是电子从基态跃迁到第 n 个激发态的跃迁偶极矩，其中 z 轴是指向分子链的.

预研究"光加孤子(或激子)和电子"系统在微扰势式(13)的作用下，由初态

$$|m\rangle=C_{Q_0\sigma_0}^+|0\rangle_{op}B_s^+|0\rangle_{ex}(\pi_q(i_q!))^{-\frac{1}{2}}(A_{+q})i_q|0\rangle_{ph}|0\rangle_e\qquad(15)$$

跃迁到末态

$$|fk\rangle=D_{Q\sigma}^+|0\rangle_{op}B_k^+|0\rangle_{ex}(\pi_q(i_q!))^{-\frac{1}{2}}(a_q^+)^{iq}|0\rangle_{ph}|0\rangle_e\qquad(16)$$

在单位时间内的跃迁几率. 很明显，其初态是由具有波矢为 $\vec{Q}_0$ 和极化矢量 $\vec{e}_{\sigma0}(Q_0)$的光子、以速度 V 运动的孤子、新声子和电子激发态组成，而末态是由具有波矢为 $\vec{Q}$和极化矢量为 $\vec{e}_\sigma(Q)$的光子、激子、原始声子和电子激发态组成，此态无孤子存在. 这表明此跃迁伴随孤子的消失、光波的改变和电子激发态不变的喇曼散射. 根据量子微扰理论，对于上述这类从初态到末态的跃迁问题，我们感兴趣的跃迁几率可表示为

$$\frac{d}{dt}W(Q_0\sigma_0\to Q\sigma)=\frac{d}{dt}\frac{1}{\hbar^6}\sum_{k,ph}\left|\int_{-\infty}^{t}dt_1\int_{-\infty}^{t_1}dt_2\int_{-\infty}^{t_2}dt_3\right.$$
$$\left.\langle fk|H_{int}(t_1)H_{int}(t_2)H_{int}(t_3)|m\rangle\right|^2.\qquad(17)$$

这里　　$H_{int}(t)=\exp(j\tilde{H}_0t/\hbar)H_{int}\exp(-j\,\tilde{H}_0t/\hbar)$，

$$\tilde{H}_0=\overline{H}+H_{0p}+H_e-h\sum_{kn}\hbar VD_{kn}^{+}D_{kn}-h\sum_{Q,\sigma}(\vec{Q}\cdot\vec{V})C_{Q\sigma}^{+}C_{Q\sigma}.\tag{18}$$

在研究此问题中我们对计算长时间的跃迁几率$\lim\limits_{t\to\infty}\frac{dw}{dt}$更感兴趣，通过冗长的计算我们得到

$$\lim_{t\to\infty}\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t}=\frac{\pi\gamma_0}{2\hbar^2\mu\sum n_0n}U_{\sigma_0n_0}(Q_0)X_{n_0n}(Q_{0x}-Q_x)U_{\sigma n}{}^{*}(Q)\{[\epsilon_{n_0}(Q_{0x})-\hbar\,\omega Q_0]^{-1}$$

$$\cdot[\epsilon_n(Q_x)-\hbar\,\omega_Q]^{-1}+[\epsilon_{n_0}(-Q_{0x})+\hbar\,\omega_{Q_0}]^{-1}[\epsilon_n(-Q_x)+\hbar\,\omega_Q]^{-1}\}$$

$$\cdot[r_0(Q_{0x}-Q_x)]^2\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\,\frac{sech^2[\frac{\pi r_0}{2\mu}(Q_{0x}-Q_x-k)]}{\mu^2+(kr_0)^2}\cdot R_e\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\exp$$

$$\{\frac{j}{\hbar}[E'_s-W-E_k+\hbar\,(\omega_{Q_0}\omega_Q)+\hbar\,(\vec{Q}_0-\vec{Q})\cdot\vec{V}]+g(t)+\rho(t)\},\tag{19}$$

这里 $g(t)=\frac{1}{N}\sum_q|f_q|^2[\exp(-j(wq-vq)t)-1]$，$E's=Es+\epsilon_0-2J-\frac{\hbar^2v^2}{2Jr_0^2}-\mu^2J$，$\rho(t)=-\frac{1}{N}\sum_q|fq|^2[\sin((wq-vq)t/2)]$. 除非$|k||k'|$是具有 $2\mu\pi\gamma_0$ 的大小，或更小，否则矩阵元

$$U(kk')=\langle f\vec{k}\,|\exp|[j\sum^{q}(w_q-vq)A_q{}^{+}A_qt](A_k^{+}+A_{-k})$$

$$\cdot\exp(-j\sum^{q}(wq-vq)a_q^{+}a_qt)(A_{k'}^{+}+A_{-k'})|m\rangle\tag{20}$$

的非对角项是可以忽略的. 由于在 $\pi^2/2\mu\gg1$ 的条件下，小波矢对上述求和的贡献极小，则我们可用 $I(kk'')\delta kk''$ 代替上面的 $U(kk'')$，其中

$$I(kk'')=e^{j(wk-kv)t}<fk''|A_k^{+}\exp[j\sum^{q}(wq-vq)A_q^{+}t]\exp[-j\sum^{q}(wq-vq)$$

$$a_q^{+}a_qt]A_k|m>=\exp[j(wk-kv)t]\exp[g(t)+\rho(t)].\tag{21}$$

在孤子的速度较小(即 $V\to0$)时，我们近似得到 $g(t)=g_0\int_0^{\infty}X[\exp(-jw_\sigma tx)-1]\mathrm{d}x/\sinh^2x$，$g_0=\frac{\alpha(\chi_1+\chi_2)^2\hbar}{\omega_0{}^2\omega_\sigma V}$，$\omega_\sigma=\frac{2\mu V_0}{\gamma_0\pi}$. 当 $t>0.002/\omega_\sigma$ 时，$g(t)=-g_0[\ln(\omega_\sigma t/2)+1.587+j\pi/2]$，$\rho(t)=-4g_0\int_0^{\infty}X\sin(\omega_\sigma tX/2)\mathrm{d}x/\sinh^2x\approx2g_0[1-\frac{\pi\omega_\sigma}{2}+\mathrm{cth}(\frac{\pi\omega_\sigma t}{2})]$，并有 $\lim\limits_{t\to\infty}\rho(t)=-\gamma_t$，$\gamma=g_0\pi\omega_\sigma=\frac{\hbar^3(\chi_1+\chi_2)^4}{4\omega_0^4\beta^2J\pi}=4\mu^2J/\hbar\pi$. 现设 $A_{ks}(\vec{Q},\vec{Q}_0)=E_k-Es+(2J-\epsilon_0+\frac{\hbar^2v^2}{2J\gamma_0^2}+\mu^2J)+\hbar\,\omega_Q-\hbar\omega_{Q_0}-\hbar\omega_{Q0}-\hbar(\vec{Q}-\vec{Q}_0)\cdot\vec{V}$，由于孤子的速度远小于光速，则上式最后一项可以忽略，于是得到

$$A_{ks}=E_k-E_s+(2J-\epsilon_0+\mu^2J)+\hbar\,(\omega_Q-\omega_{Q_0})=A_{ks}(W_Q,W_{Q_0}).\tag{22}$$

当 $V\to0$ 时，利用式(21)和(22)的结果，可得到 $\mathrm{Re}\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\exp\{\frac{1}{\hbar}[-\gamma t-g(t)-j(A_{ks}(0)-w)t]\}=\frac{\Gamma(1-g_0)[\gamma^2+((A_{ks}(0)-w)/\hbar)^2]^{\frac{(g_0-1)g_0}{2}}}{(2.42\omega_\sigma)^{g_0}}\cos[g_0(\frac{\pi}{2}-\varphi)+\varphi]$. 使用以上给出的 α-螺旋蛋白质的物理参数值，可求得 $g_0=0.1-0.07<1$，于是有

$$\mathrm{Re}\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\exp[-\gamma t-g(t)-j(A_{ks}(0)-w)t/\hbar=\frac{\hbar^2\gamma(2.42\omega_\sigma/\gamma)^{-g_0}}{\hbar^2\gamma^2+A_{ks}(0)-w)^2}].\tag{23}$$

利用以上结果我们可求出式(19)中对 K 的积分,最后可得

$$\lim_{t\to\infty}\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t}=\frac{\pi^2}{4\hbar\mu}\sum_{n_0n}U_{\sigma_0n_0}(Q_0)X_{n_0n}(Q_{0z}-Q_z)U^*_{\sigma n}(Q)\{[(\varepsilon_{n0}(Q_{0z})-\hbar\omega_{Q0})$$

$$(\varepsilon_n(Q_z)-\hbar\omega_Q)]^{-1}+[(\varepsilon_{n_0}(-Q_{0z})+\hbar\omega_{Q0})(\varepsilon_n(-Q_z)+\hbar\omega_Q)]^{-1}\}\cdot$$

$$[r_0(Q_{0z}-Q_z)]^2\cdot[\hbar\gamma\sqrt{J}(2.42\omega_a/\gamma)^{-g_0}]\cdot\{2[(A_{ks}-W)^2+(\hbar\gamma)^2]$$

$$\cdot[(A_{ks}-W)^2+(\hbar\gamma)^2)^{\frac{1}{2}}-(A_{ks}-W)]\}^{-\frac{1}{2}}$$

$$\cdot\{[\mathrm{sech}^2(\frac{\pi}{2\mu}(A_{ks}(\omega_a.\omega_{a0})/J)^{\frac{1}{2}}-(Q_{0z}-Q_z)\gamma_0)+\mathrm{sech}^2$$

$$(\frac{\pi}{2\mu}(A_{ks}(\omega_a.\omega_{a0})/J)^{\frac{1}{2}}+(Q_{0z}-Q_z)\gamma_0)]/[\mu^2J+A_{ks}(\omega_a,\omega_{a0})]\}. \tag{24}$$

由于喇曼散射的微分散射截面与跃迁几率密切相关,于是从式(24)可求前者.式(24)的跃迁几率在散射光频率接近于入射光频率时有一个极大峰值,我们对这个散射截面感兴趣..由量子理论可求出由孤子导致喇曼散射的微分截面积为

$$\frac{\mathrm{d}N}{N\mathrm{d}\Omega}=\frac{d^2\delta}{\mathrm{d}\omega_q\mathrm{d}\Omega}=\frac{V2\omega_{a_0}}{4\pi^2}=\frac{\gamma r_0^2\omega_{a0}{}^2\omega_a{}^2(2.42\omega_a/\gamma)^{-g_0}}{8\mu^3\sqrt{J}c^6}$$

$$\{\alpha[(A_{ks}-W)^2+(\hbar\gamma)^2]\cdot\cdot[((A_{ks}-W)^2+(\hbar\gamma)^2)^{1/2}-(A_{ks}-W)]\}^{-\frac{1}{2}}$$

$$\sum_\sigma\sum_{n_0n}U_{\sigma_0n_0}(Q_0)X_{n_0n}(Q_{0z}-Q_z)U_{\sigma n}(Q)\{[(\varepsilon_{n0}(Q_{0z})-\hbar\omega_{Q0})\cdot$$

$$\cdot(\varepsilon_n(Q_z)-\hbar\omega_Q)]^{-1}[(\varepsilon_{n0}(Q_{0z})+\hbar\omega_{a_0})(\varepsilon_n(Q_z)+\hbar\omega_a)]^{-1}\}$$

$$\cdot[\cos\theta_0-\frac{\omega_a}{\omega_{a_0}}(\sin\theta_0\sin\theta\cos\varphi+\cos\theta_0\cos\theta)]^2$$

$$\mathrm{sech}^2[\frac{\pi\omega\alpha_0\gamma_0}{2\mu c}(\cos\theta_0-\frac{\omega_a}{\omega_{a_0}}(\sin\theta_0\sin\theta\cos\varphi+\cos\theta_0\cos\theta))], \tag{25}$$

这里 $\mathrm{d}\Omega=\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\sin\theta$ 是在散射光的方向所张的立体角.θ 是入射光 $\vec{Q}_0$ 与 Z 轴的夹角,θ_0 是 $\vec{Q}_0$ 与散射光 $\vec{Q}$ 的夹角,φ 是 $\vec{Q}$ 在 XOY 平面上的投影与 X 轴的夹角.由式(25)可知:(1)散射光的频率接近于入射光的频率时,散射截面最大;(2)散射光谱线的分布及强度依赖于 $\hbar\gamma_0^2J(2.42\omega_a/\gamma)^{-g_0}/\{\alpha[(A_{ks}(\omega_a,\omega_{a_0})-W)^2+(\hbar\gamma)^2]\cdot[((A_{ks}(\omega_a,\omega_{a_0})-W)^2+(\hbar\gamma)^2)^{\frac{1}{2}}-(A_{ks}(\omega_a,\omega_{a_0})-W)]\}^{\frac{1}{2}}$.散射标度(即散射截面积的角依赖性)在 $\mu^2J\ll\hbar\omega_{a_0}\ll\varepsilon_n(0)$ 时主要依赖于电子跃迁的偶极矩的方向,但在 $0<\hbar\omega_{a_0}<\mu^2J-\varepsilon_n(0)$ 或 $(\mu^2J+\varepsilon_n(0))<\hbar\omega_{a_0}<\alpha\varepsilon_n(0)$ 和散射光频率 ω_a 接近刺曼谱峰值时,它与耦合强度无关;(3)当 ω_Q^i 接近于 $\omega Q_0-\mu^2J/3+2J-\varepsilon_0$ 时,散射光的强度最大,即最大的散射强度相对于分子链从具有孤子的畸变态到具有激子的非畸变态的转变.注意这些特点及谱线分布的不对称性(即长波段谱线平滑,短波段谱线尖锐)我们可确定孤子在蛋白质中真实地存在.

参考文献

1 Davydov A S. *J Theor. Biol.*, 1973, 38: 559; *Phys. Scr.*, 1979, **20**: 387

2 庞小峰. 生物化学与生物物理学报, 1986, **18**: 1; 原子与分子物理学报, 1986, **3**: 275; 应用数学学报, 1986, **10**: 287

3 chrstiasen P L, Scott A C. *Self-trapping of Vibrational energy on Protein*, London: Plenum Press, 1990: 10～196

4 Cottingharn J P, Schweitzer J W. *Phys. Rev. Lett.*, 1989, **62**: 1796

5 Takeno S. *Prog. Theor. Phys. Japan*, 1984, **71**: 395; 1985, **73**: 853; 1986, **75**: 1

6 庞小峰. 原子与分子物理学报, 1987, 4: 383; 1989, 6: 1237; 自然杂志, 1992, 15: 915; 四川大学学报(自然版), 1992; **29**: 491; 物理, 1993, **22**: 331; 物理学报, 1993, **42**: 1841

7 Pang Xiao feng. *J Phys*, 1990, C2, 9541; *Acta. Math. Science*, 1993, **15**: 321; 生物物理学报, 1993, **9**(4): 631; 1994, **10**(1): 64

8 Pang Xiao feng. *Phys. Rev. E*, 1994, **49**: 4747; *Chinese J. Infrared and Millimeter Waves*, 1993, **12**: 377

9 Pang Xiao feng. *Chines Science Bulletin*, 1993, **38**: 1041, 1517, 1557, 1665; *Chinese Phys. Lett.*, 1993. **10**: 381, 437, 517

10 庞小峰. 非线性量子力学理论, 重庆: 重庆出版社, 1994: 246～518

11 Pang Xiao feng. *J. Low. Temp. Phys.*, 1985, **58**: 334; *Phys. State, Sol(b)*., 1993, **180**: 237

12 郭柏灵, 庞小峰. 孤立子, 北京: 科学出版社, 1987: 7～36, 278～316

13 Eremko A A, *et al. Phys. stat. sol(b)*, 1985, **127**: 703

THE EFFECT OF RAMAN SCATTERING RELATED TO THE SOLITONS IN ORGANIC PROTEIN MOLECULES

Pang Xiaofeng

(International Centre for Material Physics, Chinese Academy of Sciences, Shenyang, Liaoning 110015, *China; Department of Physics, Southwest Institute for Nationalities, Chengdu, Sichuan* 610041, *China)*

Xu Changtan

(Department of Physics, Shandong Linyi Education College, Linyi, Shandong 276001, *China)*

Abstract The value of red shift associated with the Stokes component of Raman scattering arising from the solitons excited in organic protein molecules was given in terms of nonlinear quantum mechanical theory and the partial diagonalization of solitonic Hamiltonian. This value is basically consistent with the experimental data of Raman scattering. The transition probability and the differential cross-section of the Raman scattering were also obtained.

Key words soliton, Raman scattering; transition probability, differential scattering cross-section, red shift, protein.