

Возникновение внутренней динамики холстейновского полярона в процессе его равномерного движения в полинуклеотидной цепочке в постоянном электрическом поле

Коршунова А.Н.^{*}, Лахно В.Д.^{}**

*Институт математических проблем биологии РАН – филиал Института прикладной
математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук,
Пушино, Московская область, Россия*

Аннотация. В данной работе рассматривается равномерное движение полярона в полинуклеотидной цепочке во внешнем постоянном электрическом поле. Проведенные вычисления показали, что блоховские осцилляции, возникающие в процессе колебательного режима движения полярона по цепочке, не исчезают полностью при переходе к режиму равномерного движения полярона по цепочке. При равномерном движении полярона по цепочке также наблюдаются блоховские осцилляции, хотя и в несколько иной форме. Показано, что форма распределения электронной плотности в поляроне в процессе его стационарного движения в постоянном электрическом поле принимает явно выраженную структуру. При этом такие характеристики блоховских осцилляций, как период блоховских осцилляций и максимальная блоховская амплитуда, демонстрируют низкоплотные составляющие полярона.

Ключевые слова: *нанобиоэлектроника, нанопровода, молекулярные цепочки, поляроны, ДНК, перенос заряда, модель Холстейна.*

ВВЕДЕНИЕ

В представленной работе проведено исследование стационарного режима движения полярона в молекулярной цепочке в начальный период времени. Проведено сравнение характера блоховских осцилляций полярона в стационарном и колебательном режимах движения. Моделирование движения полярона проведено при наличии постоянного электрического поля на основе модели Холстейна [1, 2]. Транспорт заряда в ДНК рассматривается во многих теоретических работах [3]–[14], что связано главным образом с возможностью использования одномерных молекулярных цепочек в качестве нанопроводов в нанобиоэлектронных устройствах [15]–[20]. Причем во многих работах полярон считается основным носителем тока в синтетических полинуклеотидных последовательностях [21]–[31].

Проведенные ранее исследования показывают, что в рассматриваемой системе могут реализоваться сложные динамические режимы, которые зависят от всех выбранных параметров системы: от частоты, от коэффициента трения, от длины цепочки, от характерного размера устоявшегося полярона в цепочке, который обусловлен

^{*}alya@impb.ru

^{**}lak@impb.ru

безразмерными параметрами связи электрона и решетки в цепочке. Показано также [32], что, изменяя только начальное распределение заряда и величину напряженности электрического поля, можно наблюдать самые разнообразные режимы движения и распределения заряда в цепочке. Возможность равномерного движения заряда в однородной холстейновской цепочке в постоянном электрическом поле на очень большие расстояния была показана в работе [32]. Также в работе [32] было показано хорошее соответствие теоретической [33] и численной зависимостей скорости движения заряда с постоянной скоростью от напряженности электрического поля.

Равномерное движение полярона по цепочке возможно для небольших значений напряженности электрического поля, с увеличением значения напряженности электрического поля заряд переходит в колебательный режим движения с блоховскими осцилляциями. В зависимости от выбранных параметров цепочки, в процессе блоховских осцилляций полярон может некоторое время сохранять свою форму [34]. В других случаях начальный полярон может быстро развалиться, и далее заряд движется по цепочке в направлении поля, совершая блоховские осцилляции.

Ранее, в работе [35], было показано, что в процессе стационарного движения по цепочке в постоянном электрическом поле полярон испытывает колебания Пайерлса – Набарро, обусловленные дискретностью цепочки. В данной работе показано, что в процессе стационарного движения полярона по цепочке полярон испытывает не только колебания Пайерлса – Набарро, но и небольшие осцилляции с блоховским периодом.

Для моделирования конкретного режима поведения заряда в электрическом поле необходимо подобрать подходящие параметры системы. Выбирая модельные параметры цепочек, мы можем значительно ускорить и упростить исследование как движения заряда в поле, так и характера распределения заряда по цепочке в процессе этого движения. Подбор параметров системы для каждого конкретного случая осуществляется не только в результате проведенных численных исследований, но и в соответствии с полученными результатами аналитического исследования системы в континуальном пределе [33].

В данной работе показано, что при равномерном движении полярона, сразу после мгновенного включения постоянного электрического поля, форма распределения электронной плотности в поляроне принимает явно выраженную структуру. Возникают низкоплотные составляющие полярона, со своей внутренней динамикой, отличной от динамики макрочасти полярона. И, несмотря на то, что полярон в целом двигается с постоянной скоростью, сохраняя свою форму, низкоплотные составляющие полярона демонстрируют такие характеристики блоховских осцилляций, как период блоховских осцилляций и максимальная блоховская амплитуда.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Динамическое поведение полярона при наличии постоянного внешнего поля в однородной молекулярной цепочке моделируется системой связанных квантово-классических динамических уравнений с диссипацией. В используемой нами модели ДНК рассматривается как однородная цепочка, составленная из N сайтов. Каждый сайт представляет собой нуклеотидную пару, которая рассматривается как гармонический осциллятор [31]. Для моделирования динамики квантовой частицы в цепочке из N нуклеотидных пар будем использовать гамильтониан Холстейна, в котором каждый сайт представляет собой двухатомную молекулу [1, 2]:

$$\hat{H} = - \sum_n^N \nu (|n\rangle\langle n-1| + |n\rangle\langle n+1|) + \sum_n^N \alpha q_n |n\rangle\langle n| + \sum_n^N M \dot{q}_n^2 / 2 + \sum_n^N k q_n^2 / 2 + \sum_n^N e \mathcal{E} n |n\rangle\langle n|, \quad (1)$$

где ν – матричный элемент перехода заряда между соседними сайтами (нуклеотидными парами), α – константа взаимодействия заряда со смещениями q_n , M – эффективная масса сайта, k – упругая постоянная, e – заряд электрона, \mathcal{E} – напряженность электрического поля.

Уравнения движения для гамильтониана \hat{H} приводят к следующей системе дифференциальных уравнений:

$$i\hbar\dot{b}_n = -\nu(b_{n-1} + b_{n+1}) + \alpha q_n b_n + e\mathcal{E} a n b_n, \quad (2)$$

$$M\ddot{q}_n = -\gamma\dot{q}_n - kq_n - \alpha|b_n|^2, \quad (3)$$

где b_n – амплитуда вероятности нахождения заряда на n -м сайте, $\sum_n |b_n|^2 = 1$, $\hbar = h/2\pi$, h – постоянная Планка. В классические уравнения движения (3) введена диссипация, определяемая коэффициентом трения γ .

Уравнения (2) являются уравнениями Шредингера для амплитуд вероятностей b_n , описывающими эволюцию частицы в деформируемой цепочке. Уравнения (3) представляют собой классические уравнения движения, описывающие динамику нуклеотидных пар с учетом диссипации.

Для численного моделирования движения полярона перейдем к безразмерным переменным с помощью соотношений:

$$\begin{aligned} \eta &= \tau\nu/\hbar, \quad \omega^2 = \tau^2 K/M, \\ \omega' &= \tau\gamma/M, \quad q_n = \beta u_n, \quad E = \mathcal{E} e a \tau / \hbar, \\ \varkappa\omega^2 &= \tau^3(\alpha)^2/M\hbar, \quad \beta = \tau^2\alpha/M, \quad t = \tau\tilde{t}, \end{aligned} \quad (4)$$

где τ – произвольный масштаб времени, связывающий время t и безразмерную переменную \tilde{t} .

В безразмерных переменных (4) уравнения (2), (3) примут вид:

$$i\frac{db_n}{d\tilde{t}} = -\eta(b_{n+1} + b_{n-1}) + \varkappa\omega^2 u_n b_n + E n b_n, \quad (5)$$

$$\frac{d^2 u_n}{d\tilde{t}^2} = -\omega' \frac{du_n}{d\tilde{t}} - \omega^2 u_n - |b_n|^2, \quad (6)$$

где b_n – амплитуды вероятности локализации заряда на n -ом сайте, η – матричные элементы перехода по сайтам, ω – частота колебаний n -го сайта, \varkappa – константа связи, ω' – коэффициент трения, u_n – смещения сайтов из равновесных положений, E – напряженность электрического поля, $\tilde{t} = t/\tau$, $\tau = 10^{-14}$ сек (произвольный масштаб времени).

Введенная таким образом модель является простейшей моделью, описывающей динамику заряженной частицы в полинуклеотидной цепочке, в явном виде учитывающей диссипацию в рассматриваемой системе.

В представленной работе мы исследуем движение поляронных состояний в электрическом поле в однородной незамкнутой цепочке. Для данного исследования существенно то, что цепочка является незамкнутой и имеет два конца.

Система нелинейных дифференциальных уравнений (5), (6) решается методом Рунге – Кутты четвертого порядка. Расчеты выполнялись с использованием вычислительных средств МСЦ РАН.

НАЧАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

В данной работе для моделирования движения заряда в электрическом поле были выбраны следующие значения безразмерных параметров: $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$.

Стационарному решению уравнений (5), (6) в отсутствие внешнего поля соответствует функция в виде обратного гиперболического косинуса:

$$\begin{aligned} |b_n(0)| &= \frac{\sqrt{2}}{4} \sqrt{\frac{\varkappa}{|\eta|}} \operatorname{ch}^{-1}\left(\frac{\varkappa(n - n_0)}{4|\eta|}\right), \\ u_n(0) &= |b_n(0)|^2/\omega^2, \quad du_n(0)/d\tilde{t} = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Определим характерный размер распределения заряда в цепочке как $\lim_{\tilde{t} \rightarrow \infty} d(\tilde{t})$, где

$$d(\tilde{t}) = \sum |b_n(\tilde{t})|^2 / \sum |b_n(\tilde{t})|^4 = 1 / \sum |b_n(\tilde{t})|^4. \quad (8)$$

Полярон, соответствующий стационарному решению уравнений (5), (6) в континуальном пределе, не является устоявшимся полярном для дискретной цепочки с любыми заданными параметрами. Устоявшимся мы называем полярон, который не смещается из своего положения в цепочке и не меняет своей формы при отсутствии электрического поля или дополнительных возбуждений в цепочке. Для поляронов большого радиуса, для которых $d(\tilde{t}) > 15$, полярон вида (7) очень близок к устоявшемуся, но от более узких полярнов отличается значительно.

При выбранных значениях параметров $\varkappa = 4$ и $\eta = 2.4$, начальное поляронное состояние вида (7) незначительно отличается от устоявшегося полярона для заданной цепочки. При таких параметрах цепочки характерный размер полярона в цепочке $d(\tilde{t}) \approx 6.88$.

Будем задавать начальные значения функции $|b_n(0)|$ в виде растянутого обратного гиперболического косинуса:

$$|b_n(0)| = \frac{\sqrt{2}}{4} \sqrt{\frac{\varkappa}{\xi|\eta|}} \operatorname{ch}^{-1}\left(\frac{\varkappa(n - n_0)}{4\xi|\eta|}\right), \quad (9)$$

где ξ – коэффициент растяжения, с помощью которого мы можем подобрать начальный полярон вида (9) максимально близким к устоявшемуся полярону, а также, мы можем взять начальный полярон уже или шире устоявшегося для формирования различных вариантов движения заряда по цепочке. Таким образом, выражение вида (9), при правильно подобранном значении ξ , можно считать приближенным решением к стационарному решению уравнений (5), (6). Для цепочки с параметрами $\varkappa = 4$ и $\eta = 2.4$ обратный гиперболический косинус, или начальный полярон вида (9), максимально близок к устоявшемуся полярону при $\xi = 0.95$.

На рисунке 1 показаны графики функций $|b_n(0)|^2$ и $u_n(0)$ вида (9) при $\xi = 0.95$, которые практически совпадают с соответствующими функциями устоявшегося полярона в заданной цепочке, поэтому вполне можно сказать, что на рисунке 1 показаны графики функций вероятностей и смещений для устоявшегося полярона.

Таким образом, для моделирования движения полярона в постоянном электрическом поле будем помещать в цепочку начальное поляронное состояние вида (9) при нужных значениях коэффициента растяжения ξ . Центр полярона поместим на сайт цепочки с номером n_0 . Значение n_0 выбирается так, чтобы в начале вычислений полярон был достаточно далеко от концов цепочки. Аналогично и длина цепочки подбирается так, чтобы в конце вычислений полярон не подошел слишком близко к концу цепочки. Поле

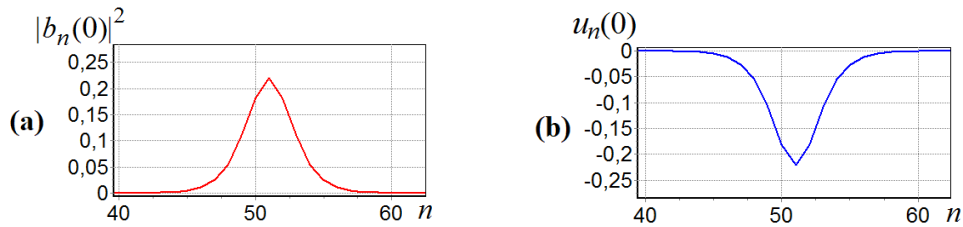


Рис. 1. Графики функций $|b_n(0)|^2$ и $u_n(0)$ для устоявшегося полярона в центре цепочки длиной $N = 101$ сайт для значений параметров цепочки $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1$.

включается ”мгновенно” в начальный момент времени.

БЛОХОВСКИЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ ПОЛЯРОНА В ПРОЦЕССЕ ЕГО КОЛЕБАТЕЛЬНОГО РЕЖИМА ДВИЖЕНИЯ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

В работе [34] нами были подробно рассмотрены блоховские осцилляции полярона в постоянном электрическом поле в цепочке с параметрами $\eta = 1.276, \omega = 0.1, \omega' = 0.006$ для различных значений параметра \varkappa . В частности, для значения $\varkappa = 1$ показано, что полярон в начальный период времени совершает блоховские осцилляции, сохраняя свою форму, и теряет свою форму постепенно, с течением времени. При этом наблюдается очень хорошее соответствие численных и теоретических характеристик блоховских осцилляций.

Характеристики блоховских осцилляций следующие. Период блоховских осцилляций $T_{BL} = 2\pi/E$. Максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} = 4\eta/E$. Максимальная скорость заряда в процессе блоховских осцилляций $V_{BL} = 2\eta$.

Рисунок 2 демонстрирует графики функций, которые характеризуют движение и распределение полярона по цепочке в электрическом поле. В представленном примере выбраны следующие значения параметров цепочки: $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$. Безразмерную величину напряженности электрического поля $E = 0.1$ мы выбрали такой, при которой не существует равномерного движения, полярон сразу разваливается и переходит в колебательный режим движения. Начальные значения $|b_n(0)|$ были выбраны в форме обратного гиперболического косинуса вида (9) при $\xi = 0.95$, то есть начальный полярон максимально близок к устоявшемуся полюрону в цепочке, который представлен на рисунке 1. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 250$.

На рисунке 2,а представлены графики функции

$$X(\tilde{t}) = \sum_n |b_n(\tilde{t})|^2 \cdot n, \tag{10}$$

описывающие движение центра масс частицы. На рисунке 2,б показан график производной функции $X(\tilde{t})$ – график функции $X'(\tilde{t})$. Период блоховских осцилляций для $E = 0.1$ равен $T_{BL} = 2\pi/E \approx 62.83$, максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} = 4\eta/E = 96$, максимальная скорость заряда в процессе блоховских осцилляций $V_{BL} = 2\eta = 4.8$. Таким образом, представленные на рисунке 2 графики наглядно демонстрируют, что основные характеристики блоховских осцилляций приблизительно соответствуют теоретическим характеристикам. Графики функций $X(\tilde{t})$ и $|b_n(\tilde{t})|^2$, представленные на рисунке 2,а и рисунке 2,с соответственно, показывают, что в начальный период времени центр масс заряда смещается примерно на максимальную блоховскую амплитуду, со временем амплитуда колебаний уменьшается, заряд продолжает двигаться по цепочке в направлении поля, совершая блоховские

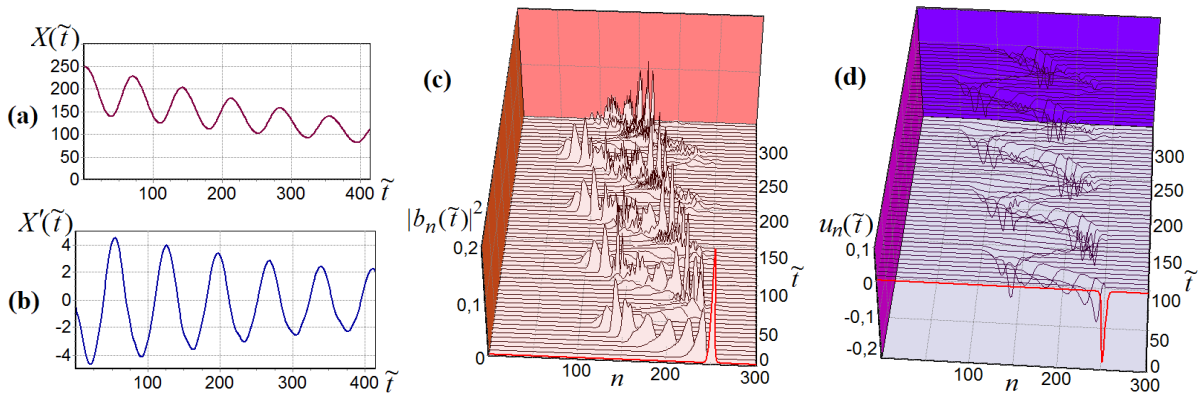


Рис. 2. Эволюция полярона в постоянном электрическом поле напряженностью $E = 0.1$ в цепочке с параметрами $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$ и длиной $N = 301$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 250$. На графике (a) представлена функция $X(\tilde{t})$, на графике (b) представлена ее производная – функция $X'(\tilde{t})$. График (c) демонстрирует динамику амплитуд вероятностей локализации заряда на n -ом сайте – функцию $|b_n(\tilde{t})|^2$. На графике (d) показаны смещения сайтов цепочки в процессе движения полярона – функция $u_n(\tilde{t})$.

осцилляции.

Максимальная скорость заряда в процессе блоховских осцилляций в показанном примере $V_{BL} \approx 4.7$ (см. рис. 2,b) совсем немного отличается от теоретической $V_{BL} = 2\eta = 4.8$, чего не будет наблюдаться при равномерном движении полярона по цепочке. На рисунке 2,d представлены графики функции $u_n(\tilde{t})$, которая описывает смещения сайтов цепочки при движении полярона. Рисунки 2,c и 2,d наглядно демонстрируют, что смещения сайтов цепочки соответствуют вероятностям распределения заряда по цепочке. Заметим, что такое хорошее соответствие графиков функций $u_n(\tilde{t})$ и $|b_n(\tilde{t})|^2$ наблюдается при больших значениях параметров $\omega = 1$ и $\omega' = 1$. При маленьких значениях ω и ω' параметров такого хорошего соответствия указанных графиков не наблюдается.

ЭЛЕМЕНТЫ БЛОХОВСКИХ ОСЦИЛЛЯЦИЙ ПОЛЯРОНА В ПРОЦЕССЕ ЕГО РАВНОМЕРНОГО ДВИЖЕНИЯ ПО ЦЕПОЧКЕ В ПОСТОЯННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

В данном разделе будет показано, что элементы блоховских осцилляций появляются и при стационарном движении полярона по цепочке. Для моделирования равномерного движения заряда в постоянном электрическом поле были выбраны следующие значения безразмерных параметров: $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$.

Представленные на рисунке 3 графики функции $X(\tilde{t})$ демонстрируют линейную зависимость от \tilde{t} для значений напряженности электрического поля $E = 0.004, E = 0.006, \dots, E = 0.018$. Максимальное время вычислений для показанных графиков превышает безразмерное время $\tilde{t} = 40000$. Для каждого графика функции $X(\tilde{t})$ на рисунке 3 продолжительность вычислений превышает десятки блоховских периодов, соответствующих заданной напряженности электрического поля. Это несомненно свидетельствует о том, что для указанных значений напряженности электрического поля мы наблюдаем равномерное движение полярона по цепочке, по крайней мере в показанные промежутки времени.

Рассмотрим подробнее распределение по цепочке начального полярона в процессе его равномерного движения в электрическом поле напряженностью $E = 0.018$.

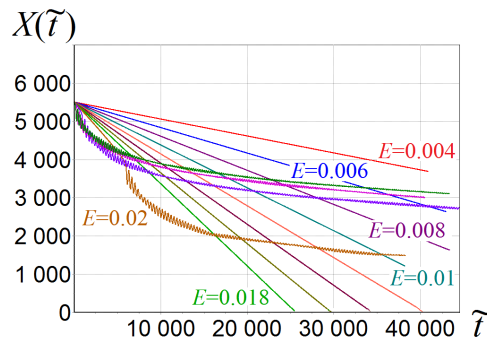


Рис. 3. Движение полярона в постоянном электрическом поле при различных значениях напряженности поля. Представлены графики функции $X(\tilde{t})$ для $E = 0.004$ (верхний график), $0.006, \dots, 0.026$. Равномерное движение полярона наблюдается при $E = 0.004, 0.006, \dots, 0.018$. Значения параметров цепочки $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 5500$. Длина цепочки $N = 7001$ сайт.

Рисунок 3 показывает, что при выбранном значении напряженности электрического поля продолжительность существования равномерного движения $\tilde{t} > 25000$.

Рисунок 4 демонстрирует графики функций $X(\tilde{t}), X'(\tilde{t}), |b_n(\tilde{t})|^2$, которые характеризуют движение и распределение полярона по цепочке в электрическом поле напряженностью $E = 0.018$. Начальные значения $|b_n(0)|$ были выбраны в форме обратного гиперболического косинуса вида (9) при $\xi = 0.95$, такой полярон максимально близок к устоявшемуся полярону в цепочке. Длина цепочки $N = 1101$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 900$.

Для выбранного значения напряженности электрического поля $E = 0.018$ период блоховских осцилляций $T_{BL} = 2\pi/E \approx 349$. Максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} = 4\eta/E \approx 533$. Представленные на рисунке 4 графики демонстрируют, что основные характеристики блоховских осцилляций приблизительно соблюдаются. График функции $X'(\tilde{t})$ на рисунке 4,b демонстрирует период блоховских осцилляций, примерно равный теоретическому периоду $T_{BL} \approx 349$. При этом графики функций $X(\tilde{t})$ на рисунке 4,a и $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рисунке 4,c указывают на равномерное движение полярона по цепочке. Амплитуда колебаний функции $X'(\tilde{t})$ очень маленькая, ее значения изменяются в пределах от $X'(\tilde{t}) \approx -0.212$ до $X'(\tilde{t}) \approx -0.214$. Вид более мелких осцилляций $X'(\tilde{t})$ на рисунке 4,b обусловлен дискретностью вывода функции на график и главным образом близостью расположения заряда к концу цепочки. При изменении этих условий построения графика функции $X'(\tilde{t})$ изменяется только вид самых мелких осцилляций, например, при более частом выводе значений $X'(\tilde{t})$ мелкие осцилляции сливаются (в масштабе графика на рис. 4,b) и график $X'(\tilde{t})$ выглядит сплошной линией. При этом более крупные осцилляции с блоховским периодом полностью соответствуют осцилляциям на рисунке 4,b.

На рисунке 4,d показан тот же график функции $|b_n(\tilde{t})|^2$, что и на рисунке 4,c, но в другом масштабе. Метка на левой шкале указывает значение 10^{-4} . Кроме того, на график выводятся только те значения функции $|b_n(\tilde{t})|^2$, которые меньше величины $5 \cdot 10^{-5}$. Значения $|b_n(\tilde{t})|^2 > 5 \cdot 10^{-5}$ на рисунке 4,d как бы обрезаны для того, чтобы были видны низкоплотные составляющие полярона, а именно область очень маленьких ненулевых значений функции $|b_n(\tilde{t})|^2$.

График функции $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рисунке 4,d показывает, что в самый начальный период времени, примерно равный половине блоховского периода, за безразмерное время

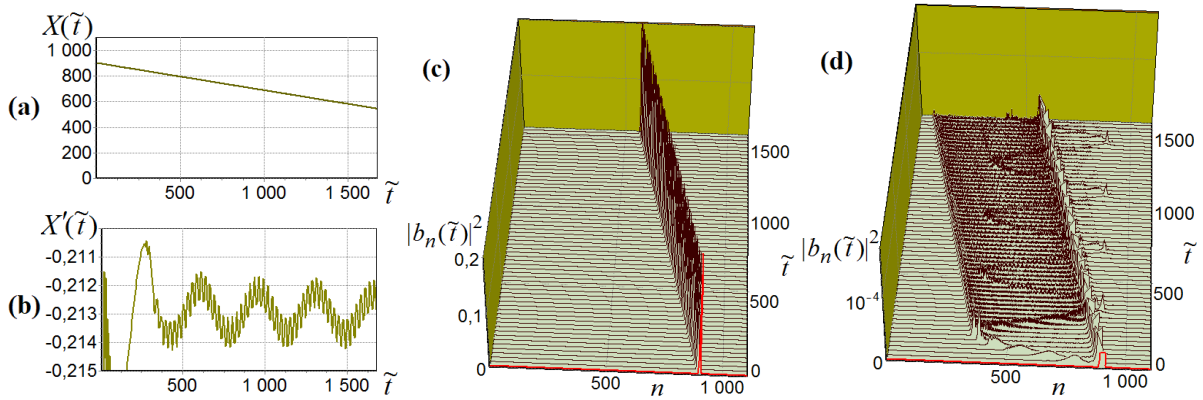


Рис. 4. Равномерное движение полярона в постоянном электрическом поле напряженностью $E = 0.018$. Графики функций $X(\tilde{t})$, $X'(\tilde{t})$, $|b_n(\tilde{t})|^2$ в процессе движения полярона в цепочке с параметрами $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$ и длиной $N = 1101$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 900$.

$\tilde{t} \approx 175 \approx 349/2$, низкоплотная составляющая полярона выдвигается перед макрочастью полярона по направлению движения полярона на ширину по сайтам, примерно равную максимальной блоховской амплитуде $A_{BL} \approx 533$. В течение второй половины блоховского периода от начала движения эта вышедшая перед поляроном часть возвращается к начальному положению центра полярона. За этот первый блоховский период центр полярона прошел несколько сайтов, и, так как мы обрезали бóльшую часть полярона, мы можем видеть, что вышедшее перед поляроном возбуждение прошло назад через макрочасть полярона именно до начального положения центра полярона. Заметим, что при колебательном режиме движения заряда по цепочке в начальный период времени заряд тоже смещается примерно на максимальную блоховскую амплитуду, но в этом случае смещается и центр масс заряда примерно на ту же величину, см. рис. 2. При дальнейшем движении полярона по цепочке эта низкоплотная составляющая полярона совершает колебания с блоховским периодом, находясь на сайтах цепочки, расположенных от центра начального полярона в сторону по направлению поля на ширину примерно одной максимальной блоховской амплитуды.

На рисунке 4,d хорошо видно, как за первую половину первого блоховского периода перед поляроном выходит составляющая часть полярона имеющая очень маленькие значения электронной плотности. Но в течение второй половины первого блоховского периода эта вышедшая составляющая полярона назад возвращается не полностью. То есть во второй половине первого блоховского периода мы наблюдаем уже две низкоплотные составляющие полярона. Одна часть – осциллирующая составляющая малой плотности. Другая составляющая движется перед поляроном, со скоростью полярона, имеет постоянную ширину распределения по сайтам, примерно равную максимальной блоховской амплитуде для заданного значения электрического поля. Никаких осцилляций во второй составляющей полярона не наблюдается. Мы назвали эту составляющую полярона предшествующей. Очевидно, что предшествующая составляющая полярона формируется за счет нахождения в цепочке полярона, сохраняющего свою форму.

Графики функций $u_n(\tilde{t})$ на рисунке 5 показывают смещения сайтов цепочки в том же вычислительном эксперименте, который представлен на рисунке 4. На рисунке 5,a графики функций $u_n(\tilde{t})$ показаны в их полном масштабе. На рисунке 5,b, по аналогии с рисунком 4,d, показаны обрезанные графики функций $u_n(\tilde{t})$. Нижняя метка на левой шкале равна -10^{-4} .

Из представленных на рисунке 5 графиков функций $u_n(\tilde{t})$ следует, что смещения

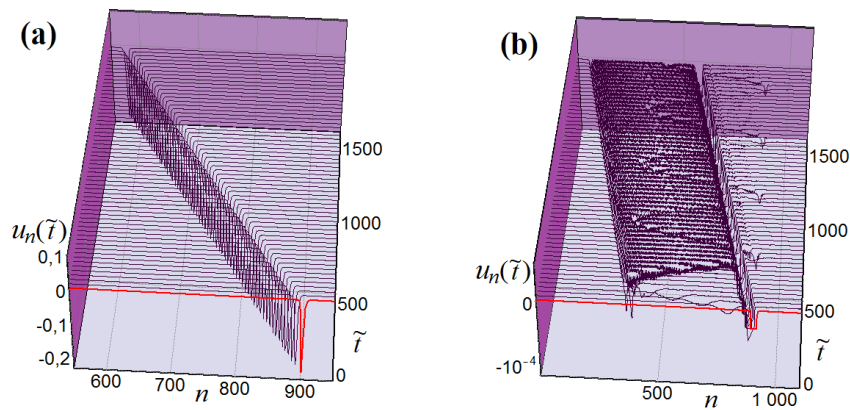


Рис. 5. Графики функций $u_n(\tilde{t})$ в процессе равномерного движения полярона в цепочке с параметрами $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$ и длиной $N = 1101$ сайтов. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 900$. Напряженность электрического поля $E = 0.018$.

сайтов соответствуют представленным на рисунке 4 функциям распределения вероятностей $|b_n(\tilde{t})|^2$. Такое хорошее соответствие смещений сайтов $u_n(\tilde{t})$ и функций распределения вероятностей $|b_n(\tilde{t})|^2$ наблюдается при больших значениях частоты колебаний сайтов цепочки $\omega = 1$ и большом значении коэффициента трения $\omega' = 1$. При маленьких значениях указанных параметров, например при $\omega = 0.01, \omega' = 0.006$, которые соответствуют параметрам цепочки ДНК, вид графиков функций $u_n(\tilde{t})$ и $|b_n(\tilde{t})|^2$ несколько отличаются друг от друга. Таким образом, при равномерном движении полярона по цепочке низкоплотные составляющие полярона формируют смещения сайтов цепочки, вид которых зависит от параметров цепочки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные вычисления показали, что элементы блоховских осцилляций наблюдаются и при стационарном движении полярона по цепочке. Показано, что при стационарном движении полярона по цепочке в постоянном электрическом поле графики функций $X(\tilde{t})$, описывающие положение центра масс полярона, демонстрируют линейную зависимость от \tilde{t} при достаточно больших значениях параметров ω и ω' , например при $\omega = 1, \omega' = 1$. При этом производная функции $X(\tilde{t})$ совершает очень незначительные по амплитуде осцилляции с блоховским периодом. При маленьких значениях параметров ω и ω' , например при $\omega = 0.01, \omega' = 0.006$, небольшие по амплитуде осцилляции с блоховским периодом заметны на графике функции $X(\tilde{t})$, при этом максимум полярона движется строго по направлению поля, не совершая заметных осцилляций, так же, как и при больших значениях параметров ω и ω' .

Показано, что при равномерном движении полярона по цепочке в начальный период времени формируются две низкоплотные составляющие полярона: осциллирующая составляющая, сохраняющая свое положение в цепочке, и идущая перед собственно поляроном предшествующая составляющая.

Осциллирующая составляющая располагается между сайтом, на котором находится центр начального полярона, и сайтом, который отстоит от начального положения на величину максимальной блоховской амплитуды в сторону по направлению поля. Ширина распределения по сайтам осциллирующей составляющей примерно равна одной максимальной блоховской амплитуде. В начальный момент времени ширина

осциллирующей составляющей может незначительно увеличиваться при изменении формы начального поляронного состояния или при уменьшении параметров ω и ω' . При уменьшении значений параметров ω и ω' , значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к осциллирующей составляющей, увеличиваются. Со временем осциллирующая составляющая немного растекается, но сохраняет свое положение в цепочке в пределах примерно одной максимальной блоховской амплитуды. С самого начала движения осциллирующая составляющая совершает колебания, период которых близок к периоду блоховских осцилляций для заданной напряженности электрического поля.

Предшествующая составляющая малой плотности тоже зависит от значений параметров ω и ω' . Значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, соответствующие предшествующей составляющей, зависят прямо пропорционально от значений коэффициента трения: чем меньше значение коэффициента трения, тем меньше значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ относящиеся к предшествующей составляющей.

Моделирование равномерного движения полярона по цепочке при различных значениях напряженности электрического поля показывает, что ширина распределения по сайтам низкоплотных составляющих полярона – осциллирующей и предшествующей – примерно равна одной максимальной блоховской амплитуде, соответствующей заданному значению напряженности электрического поля. Период колебаний осциллирующей составляющей сохраняется в течение всего времени моделирования равномерного движения полярона и примерно равен периоду блоховских осцилляций для заданного значения напряженности электрического поля.

В данной работе мы рассмотрели формирование низкоплотных составляющих полярона в начальный период движения. Более длительные вычисления показывают, что макрочасть полярона проходит область расположения осциллирующей составляющей полярона и двигается дальше по цепочке в направлении поля вместе с предшествующей составляющей. Между макрочастью полярона и остающейся на месте осциллирующей составляющей наблюдается область ненулевых значений распределения электронной плотности, эти значения тоже очень маленькие. Таким образом, макрочасть полярона вместе с предшествующей составляющей удаляются от осциллирующей составляющей полярона. Продолжительность этой фазы движения зависит от величины напряженности электрического поля: чем больше значение напряженности электрического поля, тем короче продолжительность этого движения. Затем полярон, а именно его макрочасть, начинает медленно разрушаться и, потеряв свою форму, переходит в колебательный режим движения с блоховскими осцилляциями. В процессе колебательного режима движения заряда низкоплотных составляющих полярона, конечно же, не наблюдается, поскольку нет и самого полярона.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают благодарность МСЦ РАН за предоставленные вычислительные ресурсы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Holstein T. Studies of polaron motion: Part I. The molecular-crystal model. *Annals of Phys.* 1959. V. 8. P. 325–342. doi: [10.1016/0003-4916\(59\)90002-8](https://doi.org/10.1016/0003-4916(59)90002-8)
2. Holstein T. Studies of polaron motion: Part II. The "small" polaron. *Annals of Phys.* 1959. V. 8. P. 343–389. doi: [10.1016/0003-4916\(59\)90003-X](https://doi.org/10.1016/0003-4916(59)90003-X)
3. Hennig D., Starikov E.B., Archilla J.F.R., Palmero F. Charge Transport in Poly(dG)–Poly(dC) and Poly(dA)–Poly(dT) DNA Polymers. *Journal of Biological Physics.* 2004. V. 30. №3. P. 227–238. doi: [10.1023/B:JOBP.0000046721.92623.a9](https://doi.org/10.1023/B:JOBP.0000046721.92623.a9)

4. Huang Z., Hoshina M., Ishihara H., Zhao Y. Transient dynamics of super Bloch oscillations of a one dimensional Holstein polaron under the influence of an external AC electric field. *Annalen der Physik*. 2017. V. 529. P. 1600367. doi: [10.1002/andp.201600367](https://doi.org/10.1002/andp.201600367)
5. Hennig D., Burbanks A.D., Osbaldestin A.H. Directed current in the Holstein system. *Phys. Rev. E*. 2011. V. 83. P. 031121. doi: [10.1103/PhysRevE.83.031121](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.83.031121)
6. Yakushevich L.V., Balashova V.N., Zakiryanov F.K. On the DNA Kink Motion Under the Action of Constant Torque. *Math. Biol. Bioinf.* 2016. V. 11. №1. P. 81–90. doi: [10.17537/2016.11.81](https://doi.org/10.17537/2016.11.81)
7. Starikov E.B., Lewis J.P., Sankey O.F. Base sequence effects on charge carrier generation in DNA: a theoretical study. *International Journal of Modern Physics B*. 2005. V. 19. №29. P. 4331–4357. doi: [10.1142/S0217979205032802](https://doi.org/10.1142/S0217979205032802)
8. Davydov A.S. *Solitons in Molecular systems*. Boston, USA: Reidel Publ. Comp., 1985. 413 p.
9. Scott A.C. Davydov's soliton. *Phys. Rep.* 1992. V. 217. №1. P. 1–67. doi: [10.1016/0370-1573\(92\)90093-F](https://doi.org/10.1016/0370-1573(92)90093-F)
10. De Pablo P.J., Moreno-Herrero F., Colchero J., Gómez Herrero J., Herrero P., Baró A.M., Ordejón P., Soler J.M., Artacho E. Absence of dc-Conductivity in λ -DNA. *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 85. P. 4992–4995. doi: [10.1103/PhysRevLett.85.4992](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.85.4992)
11. Porath D., Bezryadin A., De Vries S., Dekker C. Direct measurement of electrical transport through DNA molecules. *Nature*. 2000. V. 403. P. 635–638. doi: [10.1038/35001029](https://doi.org/10.1038/35001029)
12. Yoo K.-H., Ha D.H., Lee J.-O., Park J. W., Kim Jinhee, Kim J.J., Lee H.-Y., Kawai T., Choi Han Yong. Electrical Conduction through Poly(dA)–Poly(dT) and Poly(dG)–Poly(dC) DNA Molecules. *Phys. Rev. Lett.* 2001. V. 87. P. 198102. doi: [10.1103/PhysRevLett.87.198102](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.198102)
13. Kasumov A.Y., Kociak M., Guéron S., Reulet B., Volkov V.T., Klinov D.V., Bouchiat H. Proximity-Induced Superconductivity in DNA. *Science*. 2001. V. 291. № 5502. P. 280–282. doi: [10.1126/science.291.5502.280](https://doi.org/10.1126/science.291.5502.280)
14. Chepeliaskii A., Klinov D., Kasumov A., Guéron S., Pietrement O., Lyonnais S., Bouchiat H. Conduction of DNA molecules attached to a disconnected array of metallic Ga nanoparticles. *New J. Phys.* 2011. V. 13. P. 063046. doi: [10.1088/1367-2630/13/6/063046](https://doi.org/10.1088/1367-2630/13/6/063046)
15. Porath D., Cuniberti G., Di Felice R. Charge transport in DNA-based devices. *Top. Curr. Chem.* 2004. V. 237. P. 183–227. doi: [10.1007/b94477](https://doi.org/10.1007/b94477)
16. Chetverikov A.P., Ebeling W., Lakhno V.D., Velarde M.G. Discrete-breather-assisted charge transport along DNA-like molecular wires. *Phys. Rev. E*. 2019. V. 100. P. 052203. doi: [10.1103/PhysRevE.100.052203](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.052203)
17. Eudres R.G., Cox D.L., Singh R.R.P. Colloquium: The quest for high-conductance DNA. *Rev. Mod. Phys.* 2004. V. 76. P. 195–214. doi: [10.1103/RevModPhys.76.195](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.76.195)
18. Lakhno V.D. DNA nanobioelectronics. *Int. Quantum. Chem.* 2008. V. 108. P. 1970–1981. doi: [10.1002/qua.21717](https://doi.org/10.1002/qua.21717)
19. *Nanobioelectronics - for Electronics, Biology and Medicine*. Eds. Offenhausser A., Rinald R. N. Y.: Springer. 2009.
20. Taniguchi M., Kawai T. DNA electronics. *Physica E*. 2006. V. 33. P. 1–12. doi: [10.1016/j.physe.2006.01.005](https://doi.org/10.1016/j.physe.2006.01.005)
21. Conwell E.M., Rakhmanova S.V. Polarons in DNA. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2000. V. 97. P. 4556–4560. doi: [10.1073/pnas.050074497](https://doi.org/10.1073/pnas.050074497)
22. Voulgarakis Nikolaos K. The effect of thermal fluctuations on Holstein polaron dynamics in electric Field. *Physica B*. 2017. V. 519. P. 5–20. doi: [10.1016/j.physb.2017.04.030](https://doi.org/10.1016/j.physb.2017.04.030)
23. Fialko N.S., Lakhno V.D. Dynamics of Large Radius Polaron in a Model Polynucleotide Chain with Random Perturbations. *Math. Biol. Bioinf.* 2019. V. 14. №2. P. 406–419.

doi: [10.17537/2019.14.406](https://doi.org/10.17537/2019.14.406)

24. Fuentes M.A., Maniadis P., Kalosakas G., Rasmussen K.Ø. Bishop A.R., Kenkre V.M., Gaididei Yu.B. Multipeaked polarons in soft potentials. *Phys. Rev. E*. 2004. V. 70. P. 025601(R). doi: [10.1103/PhysRevE.70.025601](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.70.025601)
25. Maniadis P., Kalosakas G., Rasmussen K.Ø., Bishop A.R. Polaron normal modes in the Peyrard-Bishop-Holstein model. *Phys. Rev. B*. 2003. V. 68. P. 174304. doi: [10.1103/PhysRevB.68.174304](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.174304)
26. Астахова Т. Ю., Виноградов Г. А. Полярон в электрическом поле и колебательный спектр полиацетилена. *Математическая биология и биоинформатика*. 2019. V. 14. № 1. P. 150–159. doi: [10.17537/2019.14.150](https://doi.org/10.17537/2019.14.150)
27. Voityuk A.A., Rösch N., Bixon M., Jortner J. Electronic Coupling for Charge Transfer and Transport in DNA. *J. Phys. Chem. B*. 2000. V. 104. № 41. P. 9740–9745. doi: [10.1021/jp001109w](https://doi.org/10.1021/jp001109w)
28. Jortner J., Bixon M., Voityuk A.A., Rösch N.J. Superexchange Mediated Charge Hopping in DNA. *Phys. Chem. A*. 2002. V. 106. P. 7599–7606. hdoi: [10.1021/jp014232b](https://doi.org/10.1021/jp014232b)
29. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Formation of stationary electronic states in finite homogeneous molecular chains. *Mathematical Biology and Bioinformatics*. 2010. V. 5. №1. P. 1–29. doi: [10.17537/2010.5.1](https://doi.org/10.17537/2010.5.1)
30. Korshunova A.N., Lakhno V.D. A new type of localized fast moving electronic excitations in molecular chains. *Physica E*. 2014. V. 60. P. 206–209. doi: [10.1016/j.physe.2014.02.025](https://doi.org/10.1016/j.physe.2014.02.025)
31. Lakhno V.D. Soliton-like Solutions and Electron Transfer in DNA. *J. Biol. Phys.* 2000. V. 26. P. 133–147. doi: [10.1023/A:1005275211233](https://doi.org/10.1023/A:1005275211233)
32. Korshunova A.N., Lakhno V.D. Simulation of the Stationary and Nonstationary Charge Transfer Conditions in a Uniform Holstein Chain Placed in Constant Electric Field. *Technical Physics*. 2018. V. 63. №9. P. 1270–1276. doi: [10.1134/S1063784218090086](https://doi.org/10.1134/S1063784218090086)
33. Lakhno V.D. Davydov's solitons in a homogeneous nucleotide chain. *Int. J. Quant. Chem.* 2010. V. 110. P. 127–137. doi: [10.1002/qua.22264](https://doi.org/10.1002/qua.22264)
34. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Bloch oscillations of a soliton in a molecular chain. *Eur. Phys. J. B*. 2007. V. 55. P. 85–87. doi: [10.1140/epjb/e2007-00045-3](https://doi.org/10.1140/epjb/e2007-00045-3)
35. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Electron motion in a Holstein molecular chain in an electric field. *Euro. Phys. J. B*. 2011. V. 79. P. 147–151. doi: [10.1140/epjb/e2010-10565-2](https://doi.org/10.1140/epjb/e2010-10565-2)

Рукопись поступила в редакцию 25.11.2022.

Переработанный вариант поступил 09.12.2022.

Дата опубликования 14.12.2022.

The Incipient Formation of the Internal Dynamics of a Uniformly Moving Polaron in a Polynucleotide Chain Subjected To a Constant Electric Field

Korshunova A.N., Lakhno V.D.

Institute of Mathematical Problems of Biology RAS – the Branch of Keldysh Institute of Applied Mathematics of Russian Academy of Sciences, Pushchino, Moscow Region, 142290, Russia

Abstract. In this paper we consider the incipient formation of the internal dynamics of a uniformly moving polaron in a polynucleotide chain subjected to a constant electric field. The calculations performed show that Bloch oscillations arising in the course of the polaron oscillatory motion along the chain do not completely disappear when the polaron's motion along the chain becomes uniform. When the polaron moves uniformly along the chain, Bloch oscillations are also observed, although in a slightly different form. It is shown that the shape of the electron density distribution in a polaron during its stationary motion in a constant electric field takes an explicit structure. In this case, such characteristics of Bloch oscillations as the period of Bloch oscillations and the maximum Bloch amplitude demonstrate low-density components of the polaron.

Key words: *nanobioelectronics, nanowire, molecular chain, polaron, DNA, charge transfer, Holstein model.*