

Переход от равномерного режима движения полярона к колебательному при изменении начального поляронного состояния

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. Проведено исследование характера движения холстейновского полярона в однородной полинуклеотидной цепочке в постоянном электрическом поле в зависимости от начального поляронного состояния. Проведённые вычисления показали, что продолжительность равномерного движения полярона по цепочке конечна и зависит от всего множества параметров системы, в том числе от характерного размера начального поляронного состояния. Показано, что при фиксированном значении напряжённости электрического поля, увеличение характерного размера начального поляронного состояния приводит к сокращению времени равномерного движения полярона по цепочке. Проведённые ранее вычисления показали, что при равномерном движении полярона по цепочке, сразу после включения электрического поля формируются низкоплотные составляющие полярона, имеющие свою внутреннюю динамику, отличную от динамики макро-части полярона. При равномерном движении макро-часть полярона двигается с постоянной скоростью, сохраняя свою форму, при этом низкоплотные составляющие полярона демонстрируют такие характеристики блоховских осцилляций, как период блоховских осцилляций и максимальная блоховская амплитуда. В представленной работе показано, что изменение формы начального поляронного состояния влияет не только на продолжительность равномерного движения полярона по цепочке, но и на характеристики низкоплотных составляющих полярона.

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

ВВЕДЕНИЕ

Большое количество теоретических [1]–[9] и экспериментальных [10]–[16] работ посвящено изучению механизмов электронного транспорта в ДНК, в том числе есть исследования такого интересного явления, как блоховские осцилляции [17]–[19]. Блоховские осцилляции наблюдаются как в постоянном электрическом поле, так и при одновременном воздействии постоянного и переменного электрических полей [20]–[22]. Практический интерес к явлению блоховских осцилляций обусловлен прежде всего возможностью создания с их использованием элементов наноэлектронных устройств, в том числе источников и приемников излучения в терагерцовом частотном диапазоне, терагерцового блоховского генератора с частотой, которую можно регулировать

*alya@impb.ru

**lak@impb.ru

электрическим полем.

Проведено численное моделирование движения полярона в однородной дискретной полинуклеотидной цепочке в постоянном электрическом поле. Моделирование движения полярона по цепочке при наличии постоянного электрического поля проведено на основе модели Холстейна [23, 24]. Проведенные ранее исследования показывают, что в рассматриваемой системе могут реализоваться сложные динамические режимы, которые зависят от множества всех выбранных параметров системы. Движение заряда с постоянной скоростью возможно для небольших значений напряжённости электрического поля. С увеличением значения напряжённости электрического поля заряд теряет свою первоначальную форму и переходит в колебательный режим движения с блоховскими осцилляциями.

В работе [25] нами было показано, 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.

В работах [26] и [27] показано, что для заданного значения напряжённости электрического поля, при фиксированных значениях параметров цепочки, изменяя только начальное распределение заряда в цепочке, можно наблюдать или равномерное движение заряда по цепочке, или колебательный режим движения заряда. В этих работах было показано, что с увеличением характерного размера начального поляронного состояния происходит сокращение продолжительности равномерного движения полярона по цепочке. Но не было показано, почему это происходит, как происходит переход к колебательному режиму движения, что именно влияет на продолжительность равномерного движения полярона. В данной работе показано, что нет никакого критического значения коэффициента растяжения (или сжатия) начального поляронного состояния при котором резко происходит переход от равномерного к колебательному режиму движения при фиксированном значении напряжённости электрического поля. Показано, что этот переход происходит постепенно при постепенном изменении формы начального поляронного состояния.

В работе [25] было 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 макро-части полярона. Одну из них мы назвали осциллирующей составляющей, другую – предшествующей. В процессе равномерного движения полярона по цепочке сохраняется форма макро-части полярона, которая движется с постоянной скоростью. Осциллирующая низкоплотная составляющая полярона совершает колебания с периодом, близким к теоретическому периоду блоховских осцилляций для заданного значения напряжённости электрического поля. Ширина распределения по сайтам низкоплотных составляющих полярона – осциллирующей и предшествующей – примерно равна одной максимальной блоховской амплитуде, соответствующей заданному значению напряжённости электрического поля.

Макрочасть полярона вместе с предшествующей составляющей двигаются в направлении поля и сначала проходят область расположения осциллирующей составляющей полярона, которая сохраняет своё положение в цепочке. Затем макрочасть полярона вместе с идущей перед ней предшествующей составляющей удаляются от осциллирующей составляющей полярона. Между макрочастью полярона и остающейся на месте осциллирующей составляющей наблюдается область ненулевых значений

распределения электронной плотности, эти значения тоже очень маленькие.

Проведённые вычисления показали, что при изменении формы начального поляронного состояния изменяются значения функции распределения электронной плотности полярона, особенно относящиеся к осциллирующей низкоплотной составляющей полярона. Увеличение значений функции распределения электронной плотности полярона, относящиеся к области расположения низкоплотных составляющих полярона, приводит к сокращению продолжительности равномерного движения полярона при фиксированном значении напряжённости электрического поля.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Численное моделирование движения заряда в однородной полинуклеотидной цепочке при наличии постоянного электрического поля выполнялось на основе модели Холстейна [23, 24]. В рамках используемой модели ДНК рассматривается как однородная цепочка, составленная из N сайтов. Каждый сайт представляет собой нуклеотидную пару, которая рассматривается как гармонический осциллятор [28]. Движение заряда в постоянном электрическом поле моделируется системой связанных квантово-классических динамических уравнений с диссипацией. Динамика электрона описывается линейным уравнением Шрёдингера, а динамику сайтов с учётом диссипации описывают классические уравнения движения.

Динамика квантовой частицы в классической цепочке описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений, которая в безразмерных переменных имеет вид :

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

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

где b_n – амплитуды вероятности локализации заряда на n -ом сайте, $\sum_n |b_n(\tilde{t})|^2 = 1$, η – матричные элементы перехода по сайтам, ω – частота колебаний n -го сайта, κ – константа связи, ω' – коэффициент трения, u_n – смещения сайтов из равновесных положений, E – напряжённость электрического поля, $\tilde{t} = t/\tau$, $\tau = 10^{-14}$ сек (произвольный масштаб времени).

Уравнения (1) являются уравнениями Шрёдингера для амплитуд вероятностей b_n , описывающими эволюцию частицы в деформируемой цепочке. Уравнения (2) представляют собой классические уравнения движения, описывающие динамику нуклеотидных пар с учётом диссипации. Введённая таким образом модель, описывающая динамику заряженной частицы в полинуклеотидной цепочке, в явном виде учитывает диссипацию в рассматриваемой системе.

Система нелинейных дифференциальных уравнений (1), (2) решается методом Рунге–Кутты четвертого порядка. Расчеты выполнялись с использованием вычислительных средств МСЦ РАН.

В представленной работе мы исследуем движение поляронных состояний в электрическом поле в однородной незамкнутой цепочке, то есть цепочка имеет два конца.

НАЧАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

Цепочке polyA/polyU с зарядом, движущимся по тиминам, соответствуют следующие значения параметров: $\nu_{\text{TT}} = \nu = 0.158$ эВ, $\alpha = 0.13$ эВ/Å, $\gamma = 6 \cdot 10^{-10}$ г/с, $M = 10^{-21}$ г,

$k = 0.062 \text{ эВ}/\text{Å}^2$ (см. [29, 30]). Им соответствуют следующие значения безразмерных параметров: $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$. Для моделирования движения заряда в электрическом поле были выбраны следующие значения безразмерных параметров: $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, а значения частоты колебаний сайтов ω и коэффициента трения ω' при проведении вычислений задавались как соответствующие параметрам polyA/polyT цепочке ДНК, так и модельные: $\omega = 1$, $\omega' = 1$.

Начальные значения функции $|b_n(0)|$ задавались в виде растянутого обратного гиперболического косинуса:

$$|b_n(0)| = \frac{\sqrt{2}}{4} \sqrt{\frac{\varkappa}{\xi|\eta|}} \text{ch}^{-1}\left(\frac{\varkappa(n - n_0)}{4\xi|\eta|}\right), \quad (3)$$

где ξ – коэффициент растяжения, с помощью которого мы можем изменять форму начального полярона вида (3) для формирования различных вариантов движения заряда по цепочке. Для цепочки с параметрами $\varkappa = 4$ и $\eta = 2.4$ обратный гиперболический косинус, или начальный полярон вида (3), максимально близок к устоявшемуся полюрону при $\xi = 0.95$. В масштабе графика на рисунке 1 полярон вида (3) при $\xi = 0.95$ и при $\xi = 1.0$ совпадают, поэтому в дальнейших вычислениях мы будем использовать начальный полярон вида (3) при $\xi = 1.0$ наравне с начальным полюроном вида (3) при $\xi = 0.95$.

На рисунке 1 показаны графики функций $|b_n(0)|^2$ вида (3) при различных значениях коэффициента растяжения ξ .

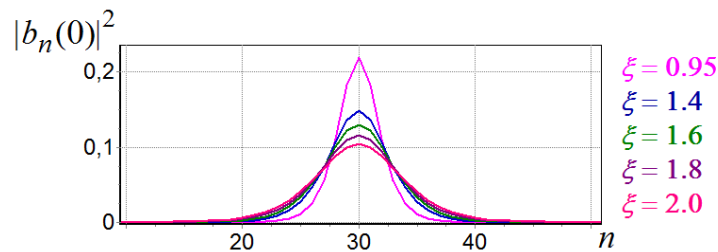


Рис. 1. Графики функций $|b_n(0)|^2$ вида (3) в цепочке длиной $N = 60$ сайтов для различных значений коэффициента растяжения ξ .

В примере на рисунке 1, как и в представленных далее примерах, сайты в цепочке пронумерованы слева направо. Значения напряжённости электрического поля мы задаём положительными: $\tilde{E} > 0$, заряды двигаются по цепочке в направлении поля справа налево, поэтому значения n_0 (положения начального поляронного состояния) задаются вблизи правого конца цепочки.

Таким образом, для моделирования движения полярона в постоянном электрическом поле будем помещать в цепочку начальное поляронное состояние вида (3) 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 и в конце вычислений полярон не подошёл слишком близко к концу цепочки. Поле включается ”мгновенно” в начальный момент времени.

ДВИЖЕНИЕ ПОЛЯРОНА В polyA/polyT ЦЕПОЧКЕ ДНК ПРИ РАЗЛИЧНЫХ НАЧАЛЬНЫХ ПОЛЯРОННЫХ СОСТОЯНИЯХ

В данном разделе мы рассмотрим движение полярона в polyA/polyT цепочке ДНК при фиксированном значении напряжённости постоянного электрического поля и при

различных начальных поляронных состояниях.

Ранее, в работах [31], [32], [26] нами было показано, что при определённых параметрах цепочки существует возможность равномерного движения заряда в холстейновской молекулярной цепочке в постоянном электрическом поле на очень большие расстояния для небольших значений напряжённости электрического поля. С увеличением значения напряжённости электрического или с изменением начального поляронного состояния поля заряд переходит в колебательный режим движения с блоховскими осцилляциями.

В данном примере были выбраны значения безразмерных параметров, соответствующие polyA/polyU цепочке ДНК: $\kappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$. Начальное поляронное состояние задавалось в виде обратного гиперболического косинуса вида (3) при различных значениях коэффициента растяжения ξ . На рисунке 2 представлены графики функции

$$X(\tilde{t}) = \sum_n |b_n(\tilde{t})|^2 \cdot n, \quad (4)$$

описывающие движение центра масс частицы.

Рисунок 2 демонстрирует графики функций $X(\tilde{t})$, которые характеризуют движение и распределение полярона по цепочке в электрическом поле напряжённостью $E = 0.014$. Начальные значения $|b_n(0)|$ были выбраны в форме обратного гиперболического косинуса вида (3) при различных значениях коэффициента растяжения ξ . Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте с номером $n_0 = 1800$ в цепочке длиной $N = 2001$ сайт. На рисунке 2 хорошо видно, что полярон сначала движется с постоянной скоростью, затем полярон, а именно его макрочасть, начинает медленно разрушаться и, потеряв свою форму, переходит в колебательный режим движения.

Для выбранного значения напряжённости электрического поля $E = 0.014$ существует равномерное движение полярона с сохранением первоначальной формы на большие расстояния. На рисунке 2,а графики функций $X(\tilde{t})$ для $\xi = 1.0, 1.1, 1.2$ в целом выглядят прямыми линиями в течение всего показанного безразмерного времени вычислений $\tilde{t} = 400000$, что указывает на равномерное движение полярона. Для остальных начальных поляронных состояний вида (3) при значениях коэффициента растяжения $\xi = 1.3, 1.4, 1.5, 1.6, 1.7$ также наблюдаются продолжительные участки равномерного движения.

На протяжении всего времени вычислений графики функций $X(\tilde{t})$ при всех значениях коэффициента растяжения ξ на рисунке 2 демонстрируют колебания с одинаковым периодом. Период этих колебаний приблизительно равен периоду блоховских осцилляций $T_{BL} = 2\pi/E$. Для выбранного значения напряжённости электрического поля $E = 0.014$ период блоховских осцилляций $T_{BL} \approx 449$.

Максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} = 4\eta/E$, для $E = 0.014$ максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} \approx 686$. Графики функций $X(\tilde{t})$ на рисунке 2 приблизительно демонстрируют максимальную блоховскую амплитуду при переходе от равномерного режима движения к колебательному и в процессе колебательного режима движения. На участках равномерного режима движения поляронов амплитуда колебаний функций $X(\tilde{t})$ на рисунке 2 значительно меньше максимальной блоховской амплитуды. Кроме того, в этом случае, амплитуды колебаний функций $X(\tilde{t})$ зависят от начального поляронного состояния вида (3), то есть, от значений коэффициента растяжения ξ . Причём эта амплитуда не изменяется на всём протяжении равномерного движения полярона для каждого отдельного значения ξ . При увеличении ширины начального поляронного состояния, или, другими словами, при увеличении коэффициента растяжения ξ , эта маленькая амплитуда колебаний полярона при его равномерном движении увеличивается.

Для всех графиков функций $X(\tilde{t})$ на рисунке 2 продолжительность вычислений на

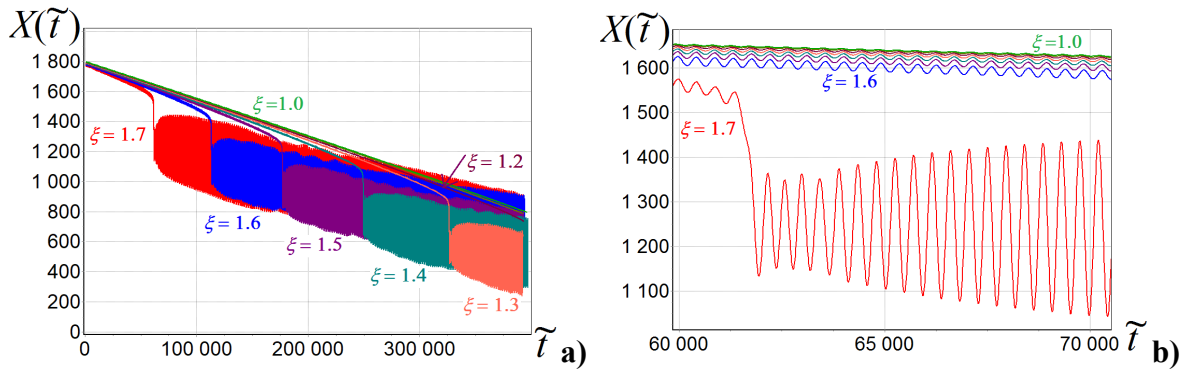


Рис. 2. Движение полярона в постоянном электрическом поле напряжённостью $E = 0.014$ в цепочке длиной $N = 2001$ сайт с параметрами $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 1800$. Графики функций $X(\tilde{t})$ демонстрируют движение полярона из различных начальных поляронных состояний вида (3) при различных значениях коэффициента растяжения ξ . Для верхнего графика задано начальное поляронное состояние вида (3) при $\xi = 1.0$. Участок графика а) показан на рисунке б) для демонстрации осцилляций полярона.

участках равномерного движения полярона превышает десятки и сотни блоховских периодов, соответствующих заданной напряженности электрического поля. Это, несомненно, свидетельствует о том, что для указанных значений напряжённости электрического поля мы действительно наблюдаем равномерное движение полярона по цепочке, в показанные промежутки времени.

В работе [25] было показано, что при равномерном движении полярона осциллирующая низкоплотная составляющая полярона совершает колебания с периодом, близким к теоретическому периоду блоховских осцилляций для заданного значения напряжённости электрического поля. При этом при больших значениях частоты колебаний сайтов $\omega = 1$ и коэффициента трения $\omega' = 1$, графики функций $X(\tilde{t})$ выглядят прямыми линиями, только их производные $X'(\tilde{t})$ показывают незначительные колебания с блоховским периодом и очень маленькой амплитудой. Период колебаний осциллирующей низкоплотной составляющей сохраняется в течение всего времени моделирования равномерного движения полярона. В примере на рисунке 2 выбраны маленькие значения параметров $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$, которые соответствуют polyA/polyT цепочке ДНК. При таких значениях $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$ осцилляции функций $X(\tilde{t})$ с блоховским периодом хорошо видны и при равномерном движении полярона и при колебательном. Но при равномерном движении полярона осциллирует только низкоплотная составляющая полярона, и амплитуда колебаний функций $X(\tilde{t})$ в десятки и сотни раз меньше амплитуды блоховских колебаний целого полярона при колебательном режиме движения полярона, см рис. 2,б.

В работе [25] было также показано что макрочасть полярона проходит область расположения осциллирующей составляющей полярона и двигается дальше по цепочке в направлении поля вместе с предшествующей составляющей. Для выбранного значения напряженности электрического поля $E = 0.014$ максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} \approx 686$. Поэтому в примере на рисунке 2 макрочасть полярона даже для $\xi = 1$. только начинает отходить от области расположения осциллирующей низкоплотной составляющей полярона, а предшествующая низкоплотная составляющая полярона уже подходит к краю цепочки. И это при больших вычислительных затратах. Поэтому более подробно рассмотрим переход от режима равномерного движения полярона к колебательному при модельных параметрах. В данном примере хорошо видны колебания

функции $X(\tilde{t})$ как при равномерном движении полярона, так и при колебательном, кроме того, это пример движения полярона в polyA/polyT цепочке ДНК. При модельных параметрах можно показать более наглядно низкоплотные составляющие полярона.

ДВИЖЕНИЕ ПОЛЯРОНА В МОДЕЛЬНОЙ ПОЛИНУКЛЕОТИДНОЙ ЦЕПОЧКЕ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ НАЧАЛЬНЫХ ПОЛЯРОННЫХ СОСТОЯНИЯХ

В этом разделе рассматривается пример движения полярона в модельной полинуклеотидной цепочке при фиксированном значении напряжённости постоянного электрического поля и при различных начальных поляронных состояниях. По сравнению с предыдущим примером изменились только значения частоты колебаний сайтов ω и коэффициента трения ω' : $\omega = 1$, $\omega' = 1$. Значение напряжённости электрического поля не изменилось: $E = 0.014$. Начальное поляронное состояние также задавалось в виде обратного гиперболического косинуса вида (3) при различных значениях коэффициента растяжения ξ .

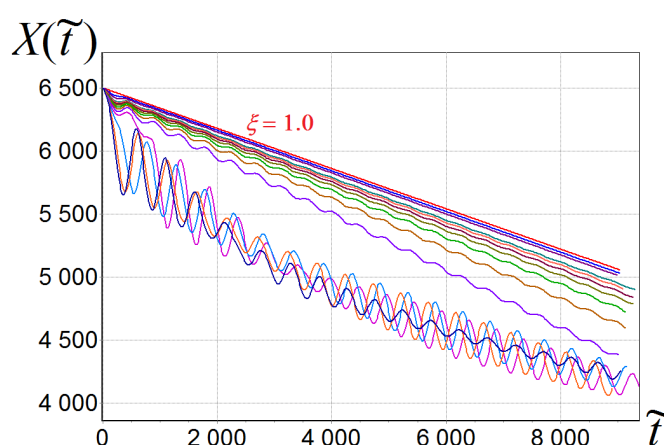


Рис. 3. Движение полярона в постоянном электрическом поле напряжённостью $E = 0.014$ в цепочке длиной $N = 7001$ сайт с параметрами $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 6500$. Графики функций $X(\tilde{t})$ демонстрируют движение полярона из начальных поляронных состояний вида (3) при различных значениях коэффициента растяжения ξ . Для верхнего графика задано начальное поляронное состояние вида (3) при $\xi = 1.0$.

Движение и распределение полярона по цепочке в электрическом поле напряжённостью $E = 0.014$ представлено графиками функций $X(\tilde{t})$ на рисунке 3. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте с номером $n_0 = 6500$ в цепочке длиной $N = 7001$ сайт.

В отличие от примера на рисунке 2, при таких больших значениях частоты колебаний сайтов цепочки $\omega = 1$ и коэффициента трения $\omega' = 1$, равномерное движение сохраняется продолжительное время даже при очень больших значениях коэффициента растяжения ξ . В работе [25] было подробно показано формирование низкоплотных составляющих полярона при таких же значениях ω , ω' и устоявшемся начальном поляронном состоянии. То есть при таком начальном состоянии, которое не меняет своей формы и не сдвигается из своего положения при отсутствии электрического поля и внешних возбуждений. Для цепочки с безразмерными параметрами $\varkappa = 4$ и $\eta = 2.4$ начальный полярон вида (3), максимально близок к устоявшемуся полярону при $\xi = 0.95$.

На рисунке 3 три верхних графика функций $X(\tilde{t})$ для $\xi = 1.0, 3.0, 4.0$, в целом выглядят прямыми линиями в течение всего показанного безразмерного времени вычислений $\tilde{t} =$

8700, что указывает на равномерное движение полярона.

На следующих семи графиках, при $\xi = 5.0, 5.2, 5.4, \dots 6.2$, уже отчётливо видны осцилляции функций $X(\tilde{t})$ с блоховским периодом, $T_{BL} \approx 449$, но с маленькой амплитудой, значительно меньше максимальной блоховской амплитуды для заданного значения напряженности электрического поля $E = 0.014$. Эти семь графиков, несмотря на хорошо заметные осцилляции функций $X(\tilde{t})$, тоже указывают на равномерное движение полярона. В этих случаях полярон, точнее его макрочасть, движется по цепочке с постоянной скоростью сохраняя свою форму в течение всего показанного времени вычислений. Осцилляции функций $X(\tilde{t})$, описывающих движение центра масс частицы, обусловлены осцилляциями низкоплотной составляющей полярона, которую мы назвали осциллирующей составляющей.

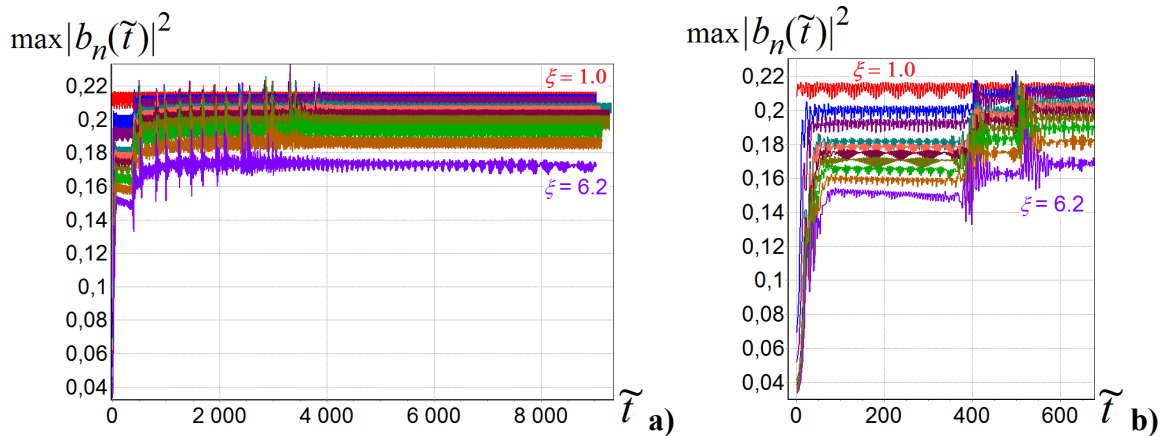


Рис. 4. Максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в процессе движения полярона в постоянном электрическом поле из начальных поляронных состояний вида (3) при следующих значениях коэффициента растяжения ξ : $\xi = 1.0, 3.0, 4.0, 5.0, 5.2, 5.4, 5.6, 5.8, 6.0, 6.2$. Для верхнего графика задано начальное поляронное состояние вида (3) при $\xi = 1.0$. Напряжённость электрического поля $E = 0.014$, длина цепочки $N = 7001$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 6500$. Параметры цепочки: $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$. На рисунке б) показана часть рисунка а) в увеличенном масштабе.

Для следующих четырёх графиков заданы начальные поляронные состояния вида (3) при $\xi = 6.4, 6.6, 6.8, 7.0$. В этих случаях начальное поляронное состояние быстро теряет свою форму и заряд переходит в колебательный режим движения с блоховским периодом для $E = 0.014$. Но в этих примерах амплитуда колебаний заряда уже соответствует максимальной блоховской амплитуде для заданного значения напряженности электрического поля, $A_{BL} \approx 686$.

Графики функций $X(\tilde{t})$ на рисунке 3 показывают, что основные характеристики блоховских осцилляций приблизительно соблюдаются.

На рисунках 3 и 4 показаны разные функции одного и того же примера. На рисунке 4 показаны максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, где $b_n(\tilde{t})$ – амплитуды вероятности локализации заряда на n -м сайте. Другими словами, графики функций на рисунке 4 показывают положения пиков поляронов, движущихся из различных начальных поляронных состояний. Графики максимумов функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рисунке 4 представлены для тех случаев, когда наблюдается равномерное движение полярона в примере на рисунке 3. Рисунок 4 наглядно демонстрирует, что с увеличением значения коэффициента растяжения ξ для начальных поляронных состояний вида (3) уменьшаются максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, то есть пик поляронов становится ниже.

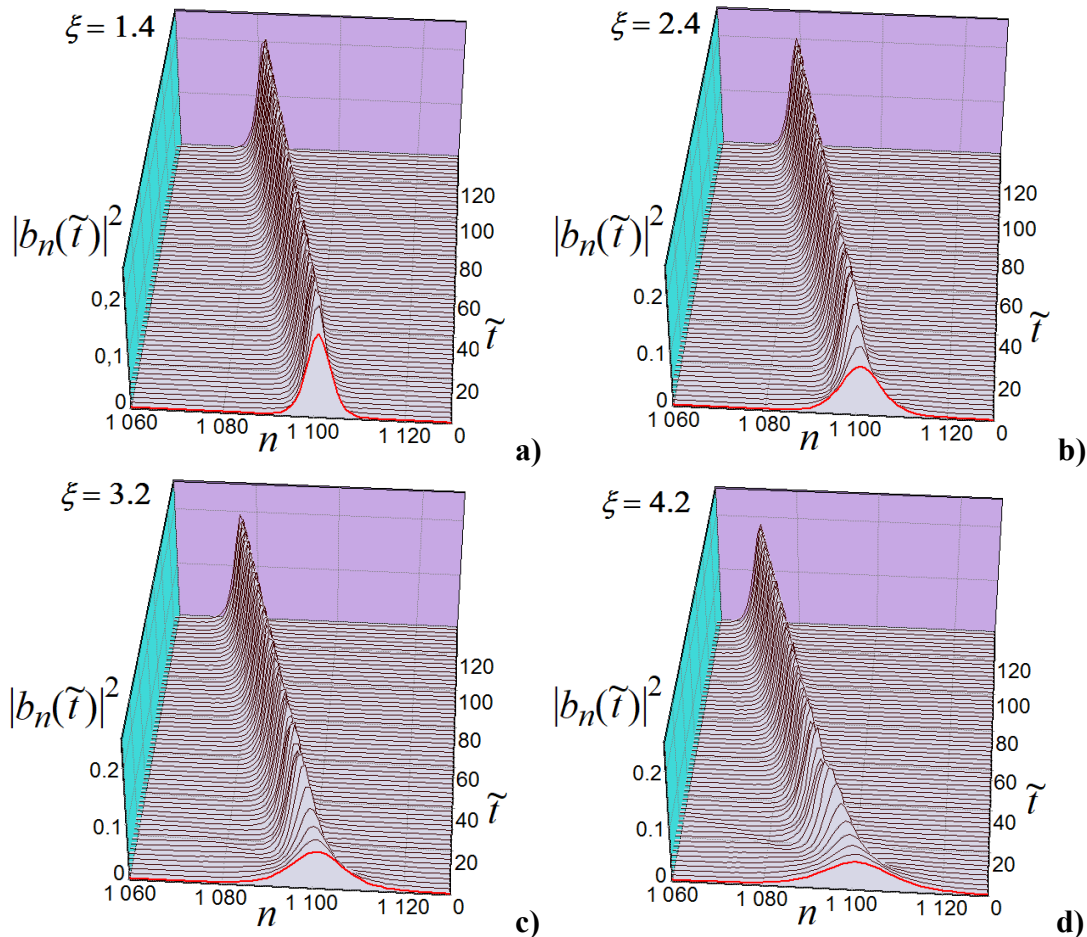


Рис. 5. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в процессе движения полярона из различных начальных поляронных состояний вида (3) при $\xi = 1.4, 2.4, 3.2, 4.2$. Напряжённость электрического поля $E = 0.014$, длина цепочки $N = 1301$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 1100$. Параметры цепочки: $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$.

Рисунок 4,б и рисунок 5 наглядно показывают, что в начальный момент времени максимум полярона быстро увеличивается. И только для случая начального поляронного состояния при $\xi = 1.0$, близком к устоявшемуся полюрону в цепочке, максимум полярона почти не изменяется, см. рис. 4 и рис. 6,а.

Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рисунке 5 демонстрируют равномерное движение полярона из различных начальных поляронных состояний вида (3) при $\xi = 1.4, 2.4, 3.2, 4.2$. В представленном примере задана длина цепочки $N = 1301$ сайт и напряжённость электрического поля $E = 0.014$. В выбранном на рисунке 5 масштабе графиков видны только макрочасти поляронов. Хорошо видно, что из растянутого начального поляронного состояния заряд быстро принимает форму, близкую к форме устоявшегося полярона в цепочке. Но из представленных на рисунке 4 графиков максимальных значений функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ следует, что форма поляронов на рисунках 5,а, 5,б и 5,с немного различается.

В работе [25] было подробно рассмотрено формирование низкоплотных составляющих полярона в начальный момент времени. Было показано, что при равномерном движении полярона по цепочке формируются две низкоплотные составляющие полярона: осциллирующая составляющая, сохраняющая свое положение в цепочке, и идущая перед собственно поляроном предшествующая составляющая.

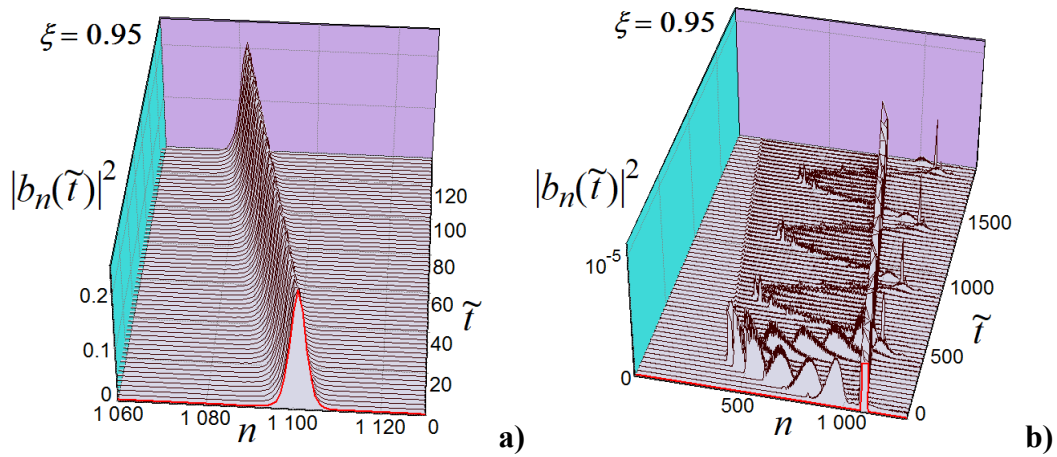


Рис. 6. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в процессе движения полярона из начального поляронного состояния вида (3) при $\xi = 0.95$. Напряжённость электрического поля $E = 0.014$, длина цепочки $N = 1301$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 1100$. Параметры цепочки: $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$. Графики показаны в различных масштабах левой шкалы.

Рисунок 6 демонстрирует графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, которые характеризуют движение и распределение полярона по цепочке в электрическом поле напряжённостью $E = 0.014$. Длина цепочки $N = 1301$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 1100$. Начальные значения $|b_n(0)|$ были выбраны в форме обратного гиперболического косинуса вида (3) при $\xi = 0.95$, такой полярон максимально близок к устоявшемуся полярону в цепочке. На рисунке 6,а полярон показан в полном размере. Этот график наглядно демонстрирует равномерное движение полярона по цепочке, хорошо видно, что никаких осцилляций макрочасть полярона не испытывает. На рисунке 6,б график функции $|b_n(\tilde{t})|^2$ показан в масштабе от 0 до 10^{-5} , чтобы видно было осциллирующую и предшествующую низкоплотные составляющие полярона. Кроме того, на график выводятся только те значения функции $|b_n(\tilde{t})|^2$, которые меньше величины $2 \cdot 10^{-6}$. Значения $|b_n(\tilde{t})|^2 > 2 \cdot 10^{-6}$ на рисунке 6,б обрезаны для того, чтобы были видны низкоплотные составляющие полярона, а именно область очень маленьких ненулевых значений функции $|b_n(\tilde{t})|^2$.

Для выбранного значения напряжённости электрического поля $E = 0.014$ период блоховских осцилляций $T_{BL} = 2\pi/E \approx 449$. Максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} = 4\eta/E \approx 686$. Представленные на рисунке 6,б, графики показывают, что основные характеристики блоховских осцилляций приблизительно соблюдаются.

График функции $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рисунке 6,б показывает, что ширина распределения по сайтам осциллирующей и предшествующей низкоплотных составляющих полярона примерно равна максимальной блоховской амплитуде для заданного значения напряжённости электрического поля $A_{BL} \approx 686$. Период колебаний осциллирующей составляющей примерно равен периоду блоховских осцилляций $T_{BL} \approx 449$.

Выше мы показали, что с увеличением значения коэффициента растяжения ξ для начальных поляронных состояний вида (3) уменьшаются максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, то есть макрочасть полярона немного изменяется, причём графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ при равномерном движении полярона из различных начальных состояний практически не различаются. Но с изменением начального поляронного состояния изменяются не только максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, изменяются также низкоплотные составляющие полярона, и эти изменения значительные.

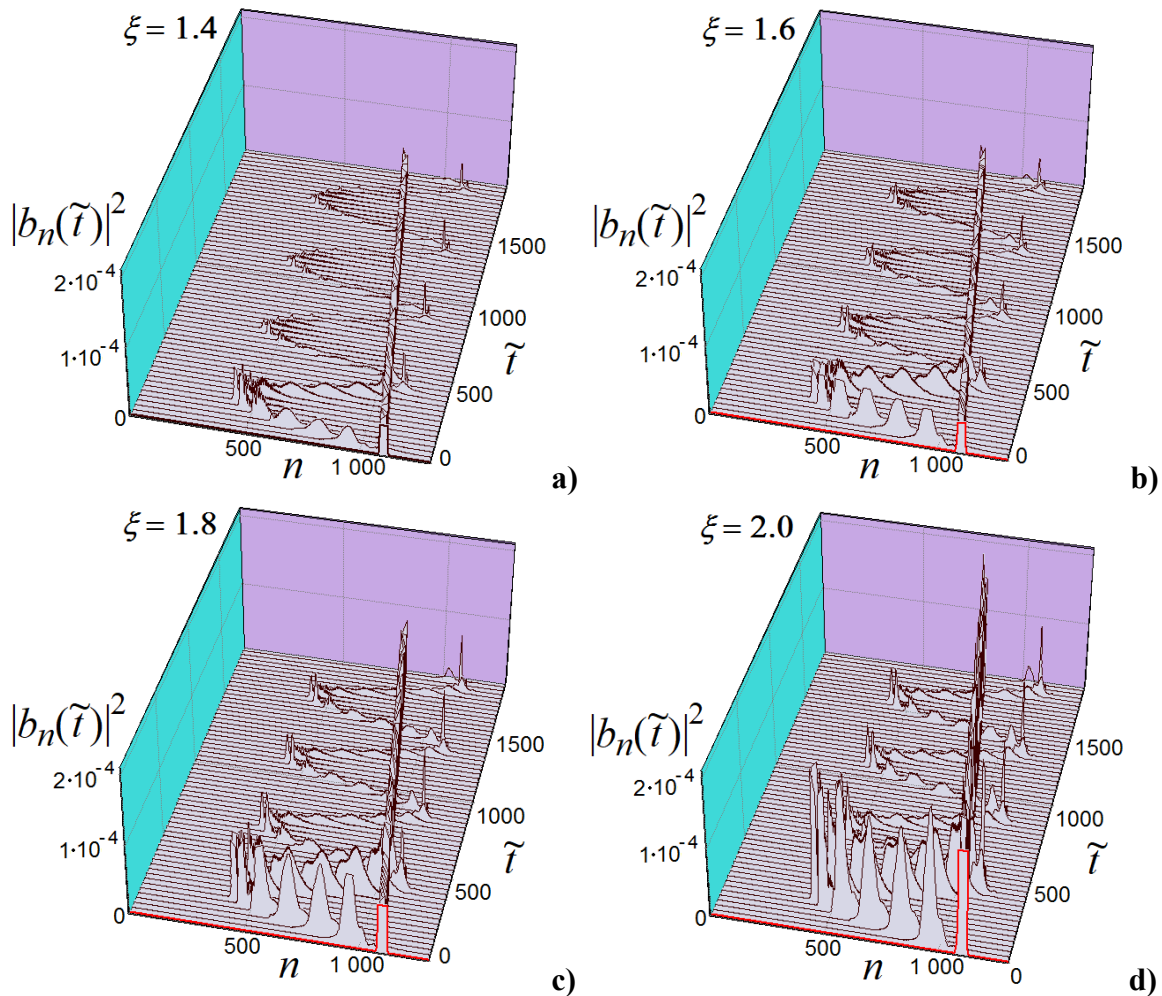


Рис. 7. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в процессе движения полярона из различных начальных поляронных состояний вида (3) при $\xi = 1.4, 1.6, 1.8, 2.0$. Напряжённость электрического поля $E = 0.014$, длина цепочки $N = 1301$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 1100$. Параметры цепочки: $\kappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$. Показана осциллирующая низкоплотная составляющая полярона.

На рисунке 7 начальные поляронные состояния заданы в форме обратного гиперболического косинуса вида (3) при $\xi = 1.4, 1.6, 1.8, 2.0$. Во всех показанных на рисунке 7 примерах центр полярона в начальный момент времени находится на сайте с номером $n_0 = 1100$ в цепочке длиной $N = 1301$ сайт. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ во всех четырёх примерах показаны в одинаковом масштабе. В выбранном на рисунке 7 масштабе видны только осциллирующие низкоплотные составляющие поляронов, предшествующая низкоплотная составляющая поляронов на порядок меньше, поэтому в заданном масштабе левой шкалы не видна. Как и на рисунке 6, значения $|b_n(\tilde{t})|^2 > 2 \cdot 10^{-5}$ на рисунке 7 обрезаны для того, чтобы были видны осциллирующие низкоплотные составляющие поляронов. В полном масштабе графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в данном примере аналогичны графикам $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рисунке 5 и демонстрируют равномерное движение полярона.

Представленные на рисунке 7 графики показывают, что небольшие изменения начального поляронного состояния приводят к значительному изменению значений функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящихся к осциллирующей низкоплотной составляющей полярона.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ ПОЛЯРОНА В ПОЛИНУКЛЕОТИДНОЙ ЦЕПОЧКЕ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ НАЧАЛЬНЫХ ПОЛЯРОННЫХ СОСТОЯНИЯХ

На рисунка 5, 6 и 7 показаны низкоплотные составляющие полярона в начальный момент времени, когда макрочасть полярона ещё находится в области расположения осциллирующей низкоплотной составляющей полярона. Далее рассмотрим характер распределения полярона по цепочке на большом времени.

Проведённые вычисления показали, что при изменении формы начального поляронного состояния изменяются значения функции распределения электронной плотности полярона, особенно относящиеся к осциллирующей низкоплотной составляющей полярона. Увеличение значений функции распределения электронной плотности полярона, относящихся к области расположения низкоплотных составляющих полярона, приводит к сокращению продолжительности равномерного движения полярона при фиксированном значении напряжённости электрического поля.

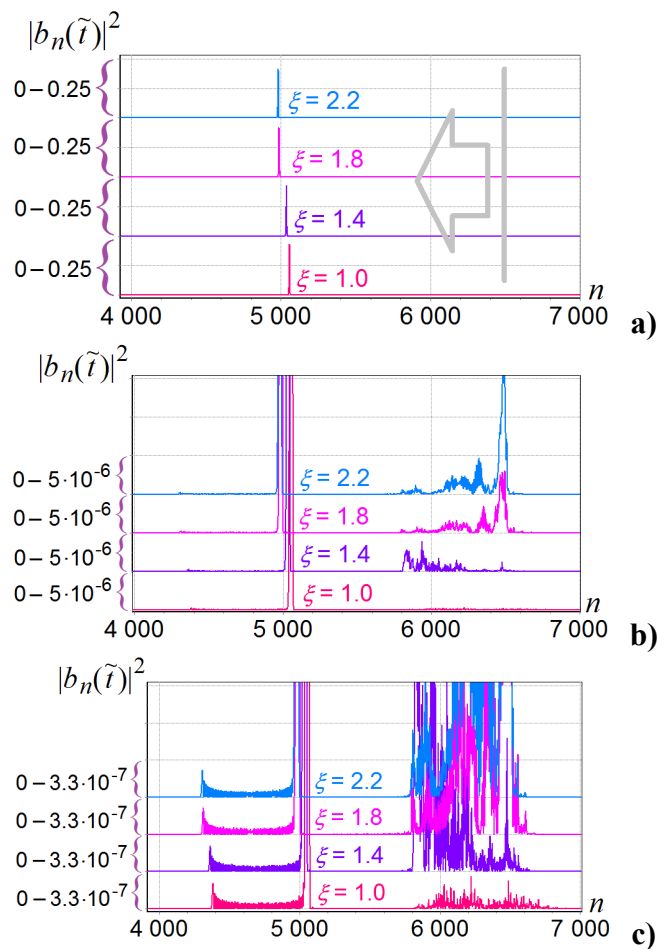


Рис. 8. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в момент безразмерного времени $\tilde{t} \approx 8700$ в процессе движения полярона из начальных поляронных состояний вида (3) при $\xi = 1.0, 1.4, 1.8, 2.2$. Напряжённость электрического поля $E = 0.014$, длина цепочки $N = 7001$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 6500$. Параметры цепочки: $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$. Графики показаны в различных масштабах левой шкалы.

На рисунке 8 показаны графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ того же примера, что и на рисунках 3, 5 и 6, при тех же и при других значениях коэффициента растяжения ξ . Графики функций

$|b_n(\tilde{t})|^2$ показаны в момент безразмерного времени $\tilde{t} \approx 8700$ в различных масштабах для левой шкалы. Графики показаны для начальных поляронных состояний вида (3) при различных значениях коэффициента растяжения ξ , $\xi = 1.0, 1.4, 1.8, 2.2$. Значения параметров цепочки те же самые: $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 6500$. Длина цепочки $N = 7001$ сайт.

На каждом из трёх рисунков на рисунке 8 показано по четыре графика функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ с одной общей нижней шкалой. Левая шкала у каждого графика своя, каждый выше расположенный график придвинут к верхней границе предыдущего графика, при этом нижерасположенный график не обрезается, а выводится на всё поле вышерасположенных графиков. Это сделано для удобства сравнения графиков.

При выбранных нами значениях параметров и начальных поляронных состояниях полярон, а именно его макрочасть, движется с постоянной скоростью по направлению поля в цепочке, приблизительно сохраняя свою форму, см. рисунки 3, 5 и 6.

Рисунок 8,а показывает графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в полном масштабе, в короткой цепочке эти графики практически совпадают с графиком функций $|b_n(0)|^2$ для $\xi = 0.95$ на рисунке 1. На рисунке 8,б показаны те же графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, что и на рисунке 8,а, но в масштабе от 0.0 до $5.0 \cdot 10^{-6}$ для каждого из четырёх графиков. В выбранном масштабе рисунке на 8,б наблюдаются ненулевые значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на сайтах от 580 до 650 (приблизительно). Это область расположения осциллирующей низкоплотной составляющей полярона. Хорошо видно, что значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, соответствующие осциллирующей низкоплотной составляющей полярона, явно зависят от начального поляронного состояния вида (3) для различных значений коэффициента растяжения ξ . А именно, с увеличением коэффициента растяжения ξ увеличиваются значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к осциллирующей низкоплотной составляющей полярона. Причём в выбранном масштабе левой шкалы осциллирующая низкоплотная составляющая полярона для $\xi = 1$ не видна, как не видны и предшествующие низкоплотные составляющие полярона.

Масштаб левой шкалы на рисунке 8,с для каждого графика задан в интервале от 0. до $3.3 \cdot 10^{-7}$. В этом масштабе хорошо видны и осциллирующие и предшествующие низкоплотные составляющие полярона для всех заданных начальных поляронных состояний. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рисунках 8,б и 8,с показывают, что ширина распределения по сайтам осциллирующей и предшествующей низкоплотных составляющих полярона примерно равна максимальной блоховской амплитуде для заданного значения напряжённости электрического поля $A_{BL} \approx 686$. И если значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к осциллирующей низкоплотной составляющей полярона, заметно увеличиваются с увеличением коэффициента растяжения ξ , то значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к предшествующей низкоплотной составляющей полярона, выглядят одинаковыми и не демонстрируют явной зависимости от напряжённости электрического поля E .

Проведённые вычисления показали, что для большого диапазона значений коэффициента растяжения ξ предшествующая низкоплотная составляющая полярона практически не зависит от значений ξ . И только при очень больших значениях ξ , при которых продолжительность равномерного движения резко сокращается с увеличением ξ , наблюдается явная зависимость всех низкоплотных составляющих полярона от ξ , другими словами, от начального поляронного состояния.

На рисунке 9 показаны графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ того же примера, что и на рисунке 8, но для больших значений коэффициента растяжения ξ , $\xi = 5.4, 5.6, 5.8, 6.0$. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ показаны в момент безразмерного времени $\tilde{t} \approx 8700$ в различных

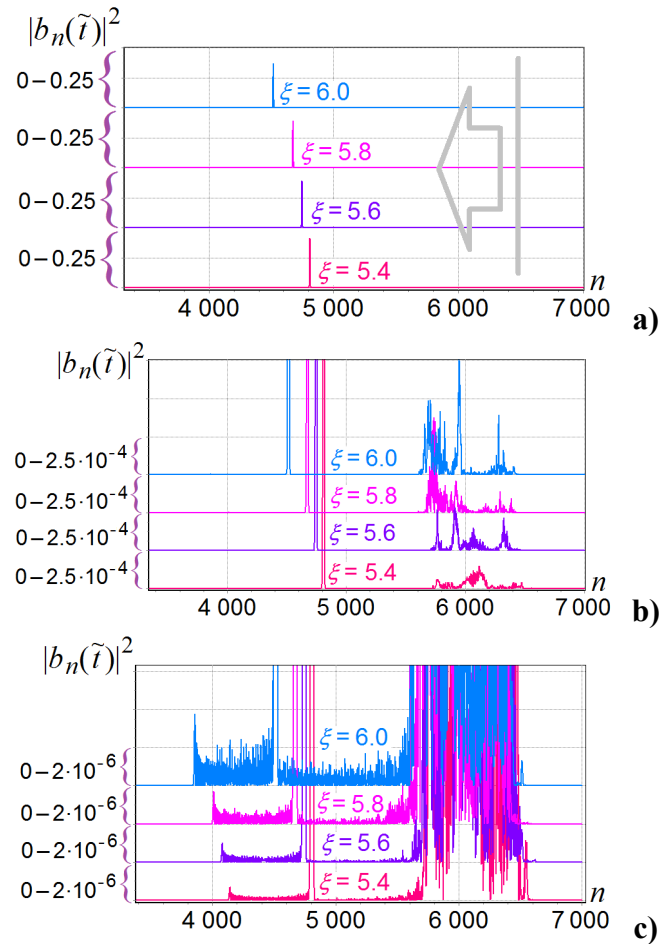


Рис. 9. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в момент безразмерного времени $\tilde{t} \approx 8700$ в процессе движения полярона из начальных поляронных состояний вида (3) при $\xi = 5.4, 5.6, 5.8, 6.0$. Напряжённость электрического поля $E = 0.014$, длина цепочки $N = 7001$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 6500$. Параметры цепочки: $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$. Графики показаны в различных масштабах левой шкалы.

масштабах для левой шкалы. Значения параметров цепочки те же самые: $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 6500$. Длина цепочки $N = 7001$ сайт. Максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, представленные на рисунке 9,а, уменьшаются при увеличении коэффициента растяжения ξ . Как и для небольших значений коэффициента растяжения ξ на рисунке 8,б, значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к осциллирующей низкоплотной составляющей полярона на рисунке 9,б, увеличиваются при увеличении ξ . Заметим, что значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к низкоплотным составляющим полярона, в примерах на рисунках 8 и 9 различаются на один–два порядка. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рисунке 9,с показывают, что ширина распределения по сайтам предшествующей низкоплотной составляющей полярона не зависит от ξ и примерно равна максимальной блоховской амплитуде для $E = 0.014$: $A_{BL} \approx 686$. Рисунок 9,с наглядно показывает, что с увеличением ξ увеличиваются не только значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к предшествующей низкоплотной составляющей полярона, но и значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к сайтам между осциллирующей низкоплотной составляющей полярона и макрочастью полярона.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показано, что перенос заряда в ДНК радикально зависит от начального распределения заряда в молекуле. Управлять этим начальным распределением можно подбирая параметры контактов, являющихся источником зарядов в ДНК. Другим способом управления эволюцией заряда является задержка во времени включения внешнего электрического поля. В данной работе рассмотрен случай мгновенного включения поля в момент появления заряда в цепочке.

Проведённые ранее исследования показали, что в процессе равномерного движения полярона по цепочке в начальный период времени, сразу после включения постоянного электрического поля, формируются две низкоплотные составляющие полярона: осциллирующая составляющая, сохраняющая свое положение в цепочке, и идущая перед собственно поляроном предшествующая составляющая. Было показано, что ширина распределения по сайтам обеих низкоплотных составляющих полярона примерно равна одной максимальной блоховской амплитуде, соответствующей заданному значению напряжённости электрического поля. Период колебаний осциллирующей составляющей сохраняется в течение всего времени моделирования равномерного движения полярона и примерно равен периоду блоховских осцилляций для заданного значения напряжённости электрического поля. В процессе равномерного движения полярона по цепочке макрочасть полярона двигается с постоянной скоростью и сохраняет свою форму на всём протяжении равномерного движения. Ранее было показано, что продолжительность равномерного движения полярона по цепочке конечна и зависит от множества параметров системы.

В данной работе было рассмотрено влияние характерного размера начального поляронного состояния на продолжительность равномерного движения полярона по цепочке и на характеристики низкоплотных составляющих полярона.

Мы рассмотрели движение полярона в polyA/polyT цепочке ДНК при фиксированном значении напряжённости постоянного электрического поля и при различных начальных поляронных состояниях. polyA/polyT цепочке ДНК с зарядом, движущимся по тиминам, соответствуют следующие значения параметров: $\nu_{\text{TT}} = \nu = 0.158$ эВ, $\alpha = 0.13$ эВ/Å, $\gamma = 6 \cdot 10^{-10}$ г/с, $M = 10^{-21}$ г, $k = 0.062$ эВ/Å² (см. [29, 30]). Им соответствуют следующие значения безразмерных параметров: $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$. На рисунке 2 показан переход от равномерного режима движения полярона к колебательному в цепочке с параметрами polyA/polyT цепочки ДНК.

Для моделирования движения заряда в электрическом поле были использованы также и цепочки с модельными параметрами. В таких цепочках можно наглядно показать низкоплотные составляющие полярона. В этом случае были выбраны значения безразмерных параметров: $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, а значения частоты колебаний сайтов ω и коэффициента трения ω' при проведении вычислений задавались модельные: $\omega = 1$, $\omega' = 1$. Проведённые вычисления показали, что ширина распределения по сайтам осциллирующей и предшествующей низкоплотных составляющих полярона практически не зависит от начального поляронного состояния и примерно равна максимальной блоховской амплитуде для заданного значения напряжённости электрического поля. Значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к осциллирующей низкоплотной составляющей полярона, заметно увеличиваются с увеличением коэффициента растяжения ξ .

Значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к предшествующей низкоплотной составляющей полярона, практически не зависят от значений ξ для большого диапазона значений коэффициента растяжения ξ . И только при очень больших значениях ξ , при которых продолжительность равномерного движения резко сокращается с увеличением ξ , наблюдается явная зависимость всех низкоплотных составляющих полярона от ξ , то

есть от начального поляронного состояния.

Таким образом, при увеличении характерного размера начального поляронного состояния продолжительность равномерного движения полярона по цепочке сокращается. Сокращение продолжительности равномерного движения полярона происходит постепенно при постепенном увеличении характерного размера начального поляронного состояния. То есть нет никакого критического значения коэффициента растяжения (или сжатия) начального поляронного состояния, при котором резко происходит переход от равномерного к колебательному режиму движения при фиксированном значении напряжённости электрического поля.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают благодарность МСЦ РАН за предоставленные вычислительные ресурсы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Maniadis P., Kalosakas G., Rasmussen K.O., Bishop A.R. ac conductivity in a DNA charge transport model. *Phys. Rev. E*. 2005. V. 72. Article No. 021912. doi: [10.1103/PhysRevE.72.021912](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.72.021912)
2. Komineas S., Kalosakas G., Bishop A.R. Effects of intrinsic base-pair fluctuations on charge transport in DNA. *Phys. Rev. E*. 2002. V. 65. Article No. 061905. doi: [10.1103/PhysRevE.65.061905](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.65.061905)
3. 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)
4. Dauxois T., Peyrard M., Bishop A.R. Dynamics and thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation. *Phys. Rev. E*. 1993. V. 47. P. 684. doi: [10.1103/PhysRevE.47.684](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.47.684)
5. Ojeda J.H., Lima R.P.A., Domínguez-Adame F., Orellana P.A. Trapping and motion of polarons in weakly disordered DNA molecules. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2009. V. 21. Article No. 285105. doi: [10.1088/0953-8984/21/28/285105](https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/28/285105)
6. Peyrard M., Cuesta-Lopez S., James G. Modelling DNA at the mesoscale: a challenge for nonlinear science? *Nonlinearity*. 2008. V. 21. P. 91–100. doi: [10.1088/0951-7715/21/6/T02](https://doi.org/10.1088/0951-7715/21/6/T02)
7. Starikov E.B. Electron–phonon coupling in DNA: a systematic study. *Philosophical Magazine*. 2005. V. 85. P. 3435–3462. doi: [10.1080/14786430500157110](https://doi.org/10.1080/14786430500157110)
8. 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)
9. 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)
10. Murphy C.J., Arkin M.R., Jenkins Y., Ghatlia N.D., Bossmann S.H., Turro N.J., Barton J.K. Long-range photoinduced electron transfer through a DNA helix. *Science*. 1993. V. 262. № 5136. P. 1025–1029. doi: [10.1126/science.7802858](https://doi.org/10.1126/science.7802858)
11. Feldmann J., Leo K., Shah J., Miller D.A.B., Cunningham J.E., Meier T., von Plessen G., Schulze A., Thomas P., Schmitt-Rink S. Optical investigation of Bloch oscillations in a semiconductor superlattice. *Phys. Rev. B*. 1992. V. 46. Article No. 7252. doi: [10.1103/PhysRevB.46.7252](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.7252)
12. Unuma T., Itagaki Y., Asakura S. Room-temperature Bloch oscillations and interminiband Zener tunneling in a GaAs-based narrow-minigap superlattice. *Applied Physics Express*. 2021. V. 14. Article No. 081003. doi: [10.35848/1882-0786/ac114f](https://doi.org/10.35848/1882-0786/ac114f)
13. Meggers E., Michel-Beyerle M.E., Giese B.J. Sequence dependent long range hole transport in DNA. *J. Am. Chem. Soc.* 1998. V. 120. P. 12950–12955. doi: [10.1021/ja983092p](https://doi.org/10.1021/ja983092p)

14. Fink H.-W., Schönberger C. Electrical conduction through DNA molecules. *Nature*. 1999. V. 398. № 6726. P. 407–410. doi: [10.1038/18855](https://doi.org/10.1038/18855)
15. Porath D., Bezryadin A., De Vries S., Dekker C. Direct measurement of electrical transport through DNA molecules. *Nature*. 2000. V. 403. №6770. P. 635–638. doi: [10.1038/35001029](https://doi.org/10.1038/35001029)
16. Lewis F.D., Liu X., Liu J., Miller S.E., Hayes R.T., Wasielewski M.R. Direct measurement of hole transport dynamics in DNA. *Nature*. 2000. V. 406. P. 51–53. doi: [10.1038/35017524](https://doi.org/10.1038/35017524)
17. Díaz E., Lima R.P.A., Domínguez-Adame F. Bloch-like oscillations in the Peyrard-Bishop-Holstein model. *Phys. Rev. B*. 2008. V. 78. Article No. 134303. doi: [10.1103/PhysRevB.78.134303](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.134303)
18. Li Y, Liu X., Fu J., Liu D., Xie S., Mei L. Bloch oscillations in a one-dimensional organic lattice. *Phys. Rev. B*. 2006. V. 74. Article No. 184303. doi: [10.1103/PhysRevB.74.184303](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.184303)
19. Buarque A.R.C., Lyra M.L., Dias W.S. Bloch-like superoscillations and unidirectional motion of phase-driven quantum walkers. *Phys. Rev. A*. 2021. V. 103. Article No. 012222. doi: [10.1103/PhysRevA.103.012222](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.103.012222)
20. Huang Zh., Hoshina M., Ishihara H., Zhao Y. Transient Dynamics of Super Bloch Oscillations of a 1D Holstein Polaron under the Influence of an External AC Electric Field. *Annalen der Physik*. 2019. V. 531. Article No. 1800303. doi: [10.1002/andp.201800303](https://doi.org/10.1002/andp.201800303)
21. Herrero-Gómez C., Díaz E., Domínguez-Adame F. Super Bloch oscillations in the Peyrard–Bishop–Holstein model. *Physics Letters A*. 2012. V. 376. P. 555–558. doi: [10.1016/j.physleta.2011.10.053](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2011.10.053)
22. Pereira A.L.S., Lyra M.L., de Moura F.A.B.F., Ranciaro Neto A., Dias W.S. Nonlinear wave-packet dynamics resonantly driven by AC and DC fields. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2018. V. 64. P. 89–97 doi: [10.1016/j.cnsns.2018.04.016](https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2018.04.016)
23. 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)
24. 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)
25. Коршунова А.Н., Лахно В.Д. Возникновение внутренней динамики холстейновского полярона в процессе его равномерного движения в полинуклеотидной цепочке в постоянном электрическом поле. *Математическая биология и биоинформатика*. 2022. Т. 17. № 2. С. 452–464. doi: [10.17537/2022.17.452](https://doi.org/10.17537/2022.17.452)
26. Коршунова А.Н., Лахно В.Д. Моделирование стационарных и нестационарных режимов движения заряда в однородной холстейновской цепочке в постоянном электрическом поле. *Журнал технической физики*. 2018. Т. 88. № 9. С. 1312–1319. doi: [10.21883/JTF.2018.09.46414.14-18](https://doi.org/10.21883/JTF.2018.09.46414.14-18)
27. Korshunova A.N., Lakhno V.D. Dependence of the nature of the Holstein polaron motion in a polynucleotide chain subjected to a constant electric field on the initial polaron state and the parameters of the chain. *Journal of Physics: Conference Series*. 2022. V. 2155. Article No. 012031. doi: [10.1088/1742-6596/2155/1/012031](https://doi.org/10.1088/1742-6596/2155/1/012031)
28. 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)
29. Lakhno V.D., Fialko N.S. HSSH-model of Hole transfer in DNA. *Eur. Phys. J. B*. 2005. V. 43. P. 279–281. doi: [10.1140/epjb/e2005-00049-y](https://doi.org/10.1140/epjb/e2005-00049-y)
30. Lakhno V.D., Fialko N.S. Solvation effects on hole mobility in the poly G/Poly C duplex. *Russian Journ. of Phys. Chem.* 2012. V. 86. P. 832–836. doi: [10.1134/S0036024412050196](https://doi.org/10.1134/S0036024412050196)
31. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Bloch oscillations of a soliton in a molecular chain. *Euro. 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)

32. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Electron motion in a Holstein molecular chain in an electric field. *Eur. 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 15.10.2023.

Переработанный вариант поступил 11.11.2023.

Дата опубликования 23.11.2023.

Mathematical Biology and Bioinformatics

doi: 10.17537/2023.18.446

===== MATHEMATICAL MODELING =====

Transition from a Uniform Mode of Polaron Motion to an Oscillatory One When the Initial Polaron State Changes

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, Russia

Abstract. A study of the nature of the motion of a Holstein polaron in a homogeneous polynucleotide chain in a constant electric field, depending on the initial polaron state, was carried out. The calculations performed showed that the duration of the uniform motion of the polaron along the chain is finite and depends on the entire set of system parameters, including the characteristic size of the initial polaron state. It is shown that at a fixed value of the electric field intensity, an increase in the characteristic size of the initial polaron state leads to a decrease in the time of uniform motion of the polaron along the chain. The calculations carried out earlier showed that with the uniform movement of the polaron along the chain, low-density components of the polaron are formed immediately after the electric field is turned on. Moreover, the low-density components of the polaron have their own internal dynamics, which are different from the dynamics of the macro-part of the polaron. With uniform motion, the macro-part of the polaron moves at a constant velocity, maintaining its shape, while the low-density components of the polaron demonstrate such characteristics of Bloch oscillations as the period of Bloch oscillations and the maximum Bloch amplitude. It is also shown that a change in the shape of the initial polaron state exerts influence upon not only the duration of the uniform motion of the polaron along the chain, but also the characteristics of the low-density components of the polaron.

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