

УДК:538.93

## ПОЛЯРОНЫ НА ОДНОМЕРНОЙ РЕШЕТКЕ В МОДЕЛИ СУ–ШРИФФЕРА–ХИГЕРА. ПЕРЕНОС ЗАРЯДА В ДНК

©2013 Астахова Т.Ю., Кашин В.А., Лихачев В.Н., Виноградов Г.А.<sup>1</sup>

*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Россия, Москва,  
119991, ул. Косыгина, д.4*

**Аннотация.** В работе подробно рассмотрены поляроны на одномерной решетке. Решетка представляет собой частицы, взаимодействующие парным потенциалом, — гармоническим или нелинейным. Электрон-фононное взаимодействия учитывается в приближении Су–Шриффера–Хигера. Сначала рассмотрены неподвижные поляроны на гармонической решетке, и для поляронов малого и большого радиусов выведены аналитические выражения. Для движущихся поляронов получены решения, устойчивость которых подтверждена численным моделированием. В континуальном пределе выведены точно решаемые уравнения, имеющие многосолитонные решения. Для ангармонической решетки в континуальном приближении также получены аналитические выражения для движущихся поляронов. Для тех значений параметров, когда континуальное приближение становится неприменимым, численно получено семейство устойчивых решений. Для некоторой области параметров модели обнаружены поляробризерные решения с огибающей состоящей из нескольких пиков. Скорость полярона определяется конкуренцией вкладов от нелинейности решетки электрон-фононного взаимодействия, и может превышать скорость звука. Проанализированы некоторые частные случаи эволюции полярона на решетке конечных размеров. Рассмотрена применимость модели для описания переноса заряда в ДНК.

**Ключевые слова:** полярон, перенос заряда, ДНК.

### ВВЕДЕНИЕ

Если заряд тем или иным образом оказывается на решетке, например, в результате инъекции с донора на цепь ДНК [1–5], то за счет электрон-фононного взаимодействия возникает локальная деформация решетки с образованием полярона. Сформировавшийся полярон не нарушает трансляционную инвариантность всей системы.

Образование поляронов является достаточно распространенным явлением, и поляроны наблюдаются в очень многих случаях: в молекулярных транзисторах [6–8], квантовых точках [9–12], углеродных нанотрубках [13, 14] и других системах. Особенно популярной оказалась поляронная теория в полупроводниковых молекулярных кристаллах [15–20]. В последнее время поляроны и биполяроны продемонстрировали свою привлекательность для объяснения транспортных явлений в купратах и в

---

<sup>1</sup>[gvin@deom.chph.ras.ru](mailto:gvin@deom.chph.ras.ru)

попытках объяснения высокотемпературной сверхпроводимости [21–24]. Еще одна область, где представления о поляронах как переносчиках заряда оказались весьма успешными — это эффективный перенос заряда в искусственных ДНК. Если искусственная ДНК состоит из регулярной последовательности оснований, например, аденина и тимина  $(A:T)_N$  и  $N \leq 100$ , то довольно неожиданно оказывается, что заряд с высокой эффективностью переносится на расстояния до 34 нм [25–30] (см. также обзоры [4, 25, 31, 32]).

Существует несколько упрощенных моделей ДНК, позволяющих провести моделирование явлений транспорта. Одна из наиболее употребительных — одномерная модель, в которой “частицами” являются основания одной из цепей ДНК, и где считается, что переноса заряда между комплементарными цепями не происходит. Но и в рамках этой простейшей крупночастицной модели имеется несколько подходов для построения теории поляронов. Один из них — полярон Холстейна [33], где “диагональное” электрон-фононное взаимодействие учитывается следующим образом:  $U^{\text{eph}} = \chi \sum_j (\psi_j \psi_j^*) x_j$ , и где  $\psi_j$  — волновая функция на  $j$ -м узле,  $x_j$  — смещение  $j$ -ого узла от положения равновесия и  $\chi$  — параметр электрон-фононного взаимодействия.

В модели Су–Шриффера–Хигера (SSH) [34] “недиагональное” электрон-фононное взаимодействие учитывается так:  $U^{\text{eph}} = \sum_j t_j (\psi_j \psi_{j+1}^* + \text{c.c.})$ , а интеграл перескока есть  $t_j = -[t_0 - \alpha(x_{j+1} - x_j)]$  и зависит от относительного смещения частиц. Иногда полярон Холстейна называют оптическим поляроном, а полярон SSH — акустическим поляроном [35]. С помощью полярона Холстейна были изучены транспортные свойства цепи ДНК, зависящие от разных внешних условий и параметров модели [36–40]. Исследования роли поляронов в транспорте заряда в ДНК также проводились в модели SSH [41–43].

Помимо разных способов учета электрон-фононного взаимодействия, используются разные модели строения цепи — начиная с гармонического приближения взаимодействия частиц и заканчивая различными нелинейными моделями.

В данной работе подробно исследованы поляроны на одномерной решетке с электрон-фононным взаимодействием, которое учитывается в приближении SSH. В первом разделе рассмотрены неподвижные и движущиеся поляроны на гармонической решетке. Сначала получены аналитические выражения для неподвижных поляронов малого и большого радиусов. Затем в континуальном пределе получены аналитические выражения для движущегося полярона. Континуальные уравнения удается свести к точно решаемому виду, имеющему многосолитонные решения.

В следующем разделе изучены поляроны на решетке с нелинейным потенциалом взаимодействия соседних частиц. Так же как и для решетки с гармоническим потенциалом, удалось получить континуальные решения солитонного типа для движущихся поляронов. В некоторых случаях удается свести систему континуальных уравнений к точно решаемому виду. При определенном соотношении параметров численными методами получены устойчивые поляробризерные решения с огибающей состоящей из нескольких пиков. Рассмотрено образование поляронов из различных начальных условий. Сделана оценка времени жизни поляронов.

## МОДЕЛЬ СУ–ШРИФФЕРА–ХИГЕРА ДЛЯ НЕПОДВИЖНОГО ПОЛЯРОНА НА ГАРМОНИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

Рассмотрим гармоническую решетку из  $N$  частиц, на которой находится лишний носитель заряда. Для определенности будем говорить об электроне, хотя подход годится

и для дырочных носителей заряда. Гамильтониан такой системы можно записать в виде

$$H = \frac{m}{2} \sum_{j=1}^N \dot{x}_j^2 + \frac{k}{2} \sum_{j=1}^{N-1} (x_{j+1} - x_j)^2 + \langle \Psi | H^{\text{eph}} | \Psi \rangle, \quad (1)$$

где введены следующие обозначения:  $x_j$  – смещение  $j$ -й частицы от положения равновесия,  $m$  – одинаковые массы всех частиц,  $k$  – коэффициент жесткости связи,  $\Psi = \Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N$  – дискретная волновая функция. Оператор электрон-фононного взаимодействия в матричном виде для решетки со свободными границами выглядит следующим образом:

$$H^{\text{eph}} = \begin{pmatrix} e_1 & t_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & e_2 & t_2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & e_3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & e_{N-2} & t_{N-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & t_{N-2} & e_{N-1} & t_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & t_{N-1} & e_N \end{pmatrix} \quad (2)$$

Матрица (2) тридиагональная с главной диагональю состоящей из энергий  $e_j$  взаимодействия заряда с  $j$ -ми узлами решетки. Побочные диагонали отвечают энергиям перескока между соседними узлами решетки. Если решетка однородная, то все узельные энергии одинаковы  $e_j = e = \text{const}$ , и без потери общности константу можно положить равной нулю, что отвечает выбору начала отсчета электронной энергии. Интеграл перескока  $t_j$  можно записать в виде, предложенном Су, Шриффером и Хигером [34]:

$$t_j = -[t_0 - \alpha(x_{j+1} - x_j)], \quad (3)$$

который линеен по относительным смещениям частиц. Здесь  $t_0$  – интеграл перескока для равновесного расположения частиц и  $\alpha$  – параметр электрон-фононного взаимодействия. Вероятность перескока возрастает при уменьшении расстояния между частицами.

Гамильтониан (1) полезно сделать безразмерным. Во-первых, это несколько упрощает вычисления, и, во-вторых, делает рассмотрение более универсальным и пригодным для решения разнообразных систем, отличающихся параметрами гамильтониана. Для обезразмеривания гамильтониана достаточно выбрать три независимых параметра. В качестве таковых в гамильтониане (1) и определении (3) выберем массу  $m$ , коэффициент жесткости связи  $k$  и энергию  $t_0$ . Тогда единицей времени будет величина  $[t] = \sqrt{m k^{-1}}$ , а единицей длины  $[L] = \sqrt{t_0 k^{-1}}$ . Например, если использовать значения параметров типичные для ДНК [42, 43], а именно,  $m = 130$  а.е.м.,  $k = 0.85$  эВ  $\text{\AA}^{-2}$  и  $t_0 = 0.3$  эВ, то единицей времени будет 0.13 пс, а единицей длины будет 0.59  $\text{\AA}$ . Параметр электрон-фононного взаимодействия также становится безразмерным:  $\alpha/\sqrt{t_0 k} \rightarrow \alpha$  и для ДНК безразмерный параметр электрон-фононного взаимодействия  $\alpha \approx 1.2$ . В безразмерном виде гамильтониан приобретает вид:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \dot{x}_j^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N-1} q_j^2 - \sum_{j=1}^{N-1} (1 - \alpha q_j) (\Psi_j^* \Psi_{j+1} + \text{c.c.}), \quad (4)$$

где для безразмерных величин сохранены те же обозначения и  $q_j \equiv (x_{j+1} - x_j)$ .

Сначала будем искать профиль и энергию *неподвижного* полярона в решеточной модели, описываемой гамильтонианом (4). Тогда первая сумма с кинетической

энергией пропадает. Для неподвижного полярона волновую функцию можно считать вещественной, так как полная волновая функция осциллирует  $\propto \exp(i\epsilon t/\hbar)$  и исключается из (4) ввиду комплексного сопряжения. С учетом этих замечаний гамильтониан превращается в

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N-1} q_j^2 - 2 \sum_{j=1}^{N-1} (1 - \alpha q_j) \psi_j \psi_{j+1}. \quad (5)$$

Если минимизировать энергию (5) по  $q_j$ , то получается

$$q_j = -2\alpha\psi_j\psi_{j+1}. \quad (6)$$

И после подстановки (6) в (5) гамильтониан приобретает вид:

$$H = -2 \sum_{j=1}^{N-1} \psi_j \psi_{j+1} - 2\alpha^2 \sum_{j=1}^{N-1} (\psi_j \psi_{j+1})^2. \quad (7)$$

Аналогичный прием был ранее использован в [42]. Выражение для энергии полярона (7) зависит только от единственного параметра  $\alpha$ .

Определим сначала профиль полярона численно для нескольких значений параметра  $\alpha$ . Минимизация осуществлялась на решетке  $N = 101$  методом наискорейшего спуска с сохранением нормировки волновой функции на каждом шаге итераций. Центр полярона находится на узле  $j = 51$ . Если размер решетки много больше радиуса полярона, то результат не зависит от размеров решетки. На рис. 1а показаны результаты для трех значений  $\alpha$ . Центр этого полярона находится на узле решетки, и такие поляроны будем называть узельными. Для бесконечной решетки центр полярона может находиться на любом узле и поэтому такое состояние бесконечно вырождено по энергии.

Но центр полярона может находиться и в междуузелье, посередине между узлами. Такой полярон назовем междузельным, и сравнение форм и энергий узельного и междузельного поляронов для одного и того же значения параметра  $\alpha$  показано на рис. 1б. Видно, что разница в энергиях очень мала (отличие в пятом знаке). Это отличие можно трактовать как очень малый барьер, разделяющий два пространственно различных состояния полярона с одинаковой энергией. Это обстоятельство послужит в дальнейшем основанием для построения выражений для свободно движущихся поляронов.

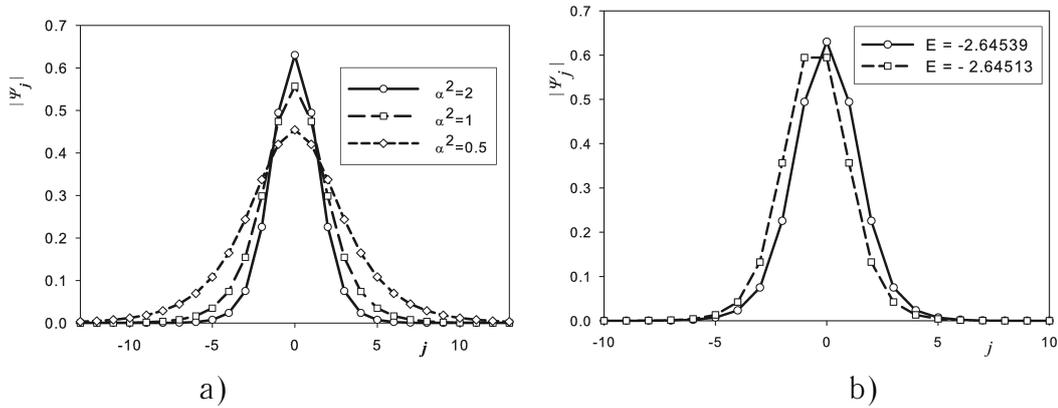
Автолокализуясь, полярон деформирует решетку и уменьшает общую длину цепочки на величину  $\Delta L$ . Из определения  $\Delta L = \sum_{j=1}^{N-1} q_j$  следует, что уменьшение полной длины решетки равно (см. (6)):

$$\Delta L = -2\alpha \sum_{j=1}^{N-1} \psi_j \psi_{j+1} \quad (8)$$

Для полярона большого радиуса волновые функции на соседних частицах отличаются не очень сильно. Поэтому сумму в (8) можно приближенно считать равной норме волновой функции, то есть равной 1, и тогда общее сжатие цепочки при образовании полярона приблизительно равно удвоенной константе электрон-фононного взаимодействия  $\alpha$ .

## 1. Аналитические выражения для полярона малого радиуса

Волновая функция полярона симметрична относительно его центра, и поэтому удобно рассматривать одну, например, правую половину полярона. Будем



**Рис. 1.** а) Профили поляронов для трех значений параметра  $\alpha$  (показаны на вставке к рисунку). б) Узельный (сплошная линия) и межузельный (пунктир) поляроны (энергии показаны на вставке к рисунку). По оси ординат отложен модуль волновой функции.

рассматривать узельный полярон в достаточно длинной решетке так, что концевым эффектом можно пренебречь. Тогда нумерация узлов решетки для правой половины полярона такая:  $j = 0, 1, 2, \dots$  (нахождение решения для межузельного полярона алгебраически немного сложнее, но методически точно такое же). Обозначим амплитуды волновой функции на центральном узле через  $\psi_0$ , а на остальных  $\psi_1, \psi_2, \dots$ . Тогда выражение (7) для энергии приобретает вид:

$$H = -4 \sum_{j=0}^{\infty} \psi_j \psi_{j+1} - 4\alpha^2 \sum_{j=0}^{\infty} (\psi_j \psi_{j+1})^2, \tag{9}$$

но уже с другой нормировкой волновой функции, которая по симметрии равна  $\psi_0^2 + 2 \sum_{j=1}^{\infty} \psi_j^2 = 1$ . Для отыскания минимума энергии (9) целесообразно ввести неопределенный множитель Лагранжа  $\mu$ , который одновременно с минимизацией сохраняет нормировку волновой функции. Тогда функционал, подлежащий минимизации, принимает вид:

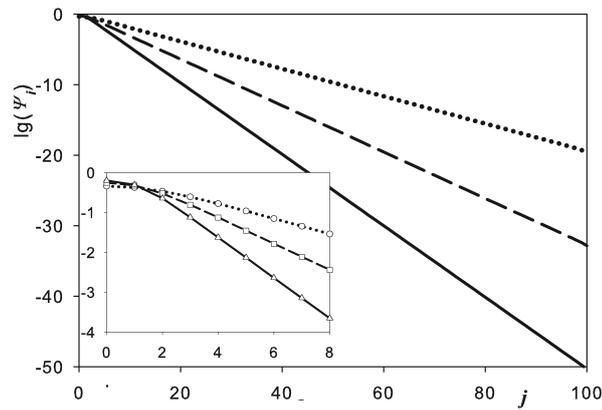
$$\tilde{H} = -4 \sum_{j=0}^{\infty} \psi_j \psi_{j+1} - 4\alpha^2 \sum_{j=0}^{\infty} (\psi_j \psi_{j+1})^2 + \mu \left( \psi_0^2 + 2 \sum_{j=1}^{\infty} \psi_j^2 - 1 \right). \tag{10}$$

Минимизация функционала (10) по переменным  $\psi_j$  приводит к следующей системе уравнений:

$$\begin{aligned} \psi_1 + 2\alpha^2 \psi_0 \psi_1^2 &= \frac{\mu}{2} \psi_0; \\ \psi_{j+1} + \psi_{j-1} + 2\alpha^2 \psi_j (\psi_{j+1}^2 + \psi_{j-1}^2) &= \mu \psi_j; \quad j \geq 1. \end{aligned} \tag{11}$$

Бесконечная система алгебраических рекуррентных уравнений (11) полностью определяет полярон. Однако с вычислительной точки зрения решать эту систему весьма затруднительно. Поэтому число уравнений в (11) нужно ограничить конечным числом.

Результаты численной минимизации для нахождения формы полярона показаны на рис. 2. Видно, что при больших значениях  $j$  волновая функция спадает с расстоянием



**Рис. 2.** Зависимости амплитуды волновой функции полярона в логарифмическом масштабе от номеров узлов решетки для трех значений параметра электрон-фононного взаимодействия  $\alpha$ . Показана правая часть полярона. Линия из точек, пунктир и сплошная линия – для  $\alpha = 0.5$ ,  $\alpha = 1.0$  и  $\alpha = 2.0$ , соответственно. На вставке показаны эти же графики вблизи центра полярона.

от центра экспоненциально:  $\Psi_j \propto \exp(-j/R)$ . Величину  $R$  назовем радиусом полярона. Другими словами, амплитуды волновой функции образуют геометрическую прогрессию:  $\Psi_{j+1}/\Psi_j = g$  при  $j \gg 1$ . Показатель геометрической прогрессии  $g$  связан с радиусом полярона  $R$  соотношением  $R = \ln^{-1} g$ . И только для малых значений  $j$  (на рис. 2 выделено во вставку) наблюдается отклонение от экспоненциального закона убывания волновой функции.

Множитель Лагранжа  $\mu$  в (11) связан с показателем геометрической прогрессии  $g$ :

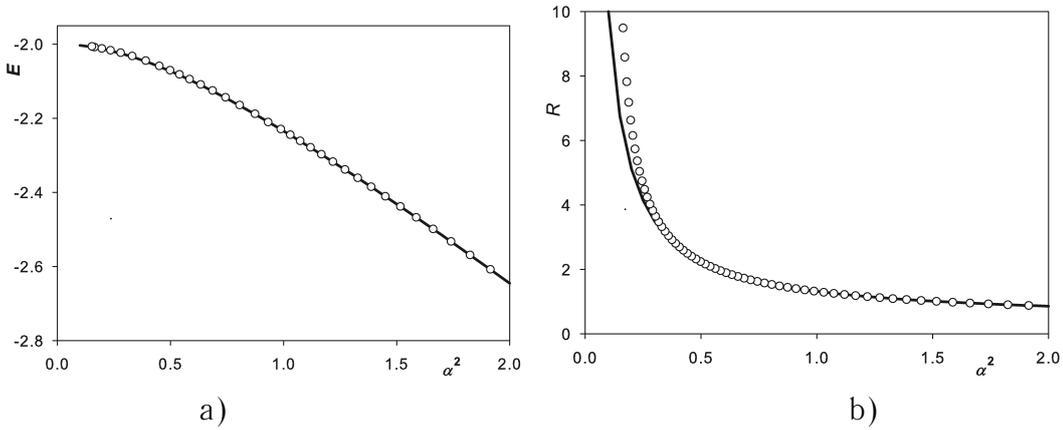
$$\mu = g + g^{-1}. \tag{12}$$

Действительно, если  $j \gg 1$ , то второе из уравнений (11) становится линейным:  $\Psi_{j+1} + \Psi_{j-1} = \mu\Psi_j$ . И его решение как раз и определяется асимптотикой  $\Psi_j \propto g^j$ . Можно также убедиться в том, что множитель Лагранжа  $\mu = -\epsilon$ , где  $\epsilon$  – электронная часть энергии полярона.

Будем строить решение для волновой функции, используя асимптотику волновой функции с использованием системы уравнений (11). Будем считать, что начиная с какого-то номера узла  $j_0$  выполняется экспоненциальный закон убывания волновой функции, а при меньших значениях  $j$  волновые функции независимы и подлежат определению. Итак, выберем  $j_0 = 3$ , и тогда пробная волновая функция будет  $\Psi_0, \Psi_1, \Psi_2, \Psi_3 = \Psi_2 g, \Psi_4 = \Psi_2 g^2, \dots$  (на вставке к рис. 2 видно, что действительно, начиная с  $j = 3$  выполняется подчинение экспоненциальному закону). В системе уравнений (11) тогда останется три уравнения:

$$\begin{aligned} \Psi_1 + 2\alpha^2 \Psi_0 \Psi_1^2 &= \frac{\mu}{2} \Psi_0; \\ \Psi_2 + \Psi_0 + 2\alpha^2 \Psi_1 (\Psi_0^2 + \Psi_2^2) &= \mu \Psi_1 \\ g\Psi_2 + \Psi_1 + 2\alpha^2 \Psi_2 (\Psi_1^2 + g^2 \Psi_2^2) &= \mu \Psi_2. \end{aligned} \tag{13}$$

Вместе с условием нормировки  $\Psi_0^2 + 2\Psi_1^2 + 2\frac{\Psi_2^2}{1-g^2} = 1$  имеем 4 уравнения для четырех



**Рис. 3.** а) Зависимость энергии полярона  $E$  от параметра электрон-фононного взаимодействия  $\alpha$ , вычисленная численно (сплошная линия), и согласно решению приближенных уравнений (13) (кружочки). б) Зависимость радиуса полярона от  $\alpha$ . Обозначения те же, что и на левом рисунке.

неизвестных величин  $\Psi_0, \Psi_1, \Psi_2$  и  $g$  (третье слагаемое в выражении для нормы волновой функции получается как сумма членов бесконечной геометрической прогрессии).

На рис. 3 показано сравнение результатов полученных при решении приближенных уравнений (13) с точной (численной) минимизацией исходного функционала энергии. Видно, что согласие достаточно хорошее. При необходимости увеличения точности можно в качестве дополнительной переменной ввести волновую функцию  $\Psi_3$ , и тогда экспоненциальное убывание начнется с  $\Psi_4$ .

Полученные выражения для полярона применимы при любых значениях параметра электрон-фононного взаимодействия  $\alpha$ . Однако при малых значениях параметра  $\alpha$ , когда радиус полярона становится достаточно большим, можно использовать континуальное приближение и получить аналитическое выражение для полярона большого радиуса.

## 2. Аналитическое выражение для полярона большого радиуса

Исходное выражение для вывода аналитического выражения для полярона большого радиуса имеет тот же вид, что и для случая полярона малого радиуса. Выпишем его для удобства еще раз:

$$\Psi_{j+1} + \Psi_{j-1} + 2\alpha^2\Psi_j(\Psi_{j+1}^2 + \Psi_{j-1}^2) = \mu\Psi_j. \tag{14}$$

Для полярона большого радиуса параметр  $g$  лишь немного меньше 1, а множитель Лагранжа  $\mu$  ( $\mu = g + 1/g$ ) немного больше 2. Введем обозначение для малой величины  $\delta$ :  $\delta^2 \equiv \mu - 2$ , и сделаем некоторые тождественные преобразования уравнения (14). Во-первых, вычтем  $2\Psi_j$  из обеих частей уравнения:

$$\frac{1}{\delta^2}(\Psi_{j+1} - 2\Psi_j + \Psi_{j-1}) + 2\frac{\alpha^2}{\delta^2}\Psi_j(\Psi_{j+1}^2 + \Psi_{j-1}^2) = \Psi_j. \tag{15}$$

Это сделано для того, чтобы первое слагаемое превратить во вторую производную, записанную в конечных разностях. Во-вторых, заменим  $\Psi_{j+1}^2 + \Psi_{j-1}^2$  на  $2\Psi_j^2$ . так как для

полярона большого радиуса разница между амплитудами волновой функции на соседних частицах мала. В результате получим:

$$\frac{1}{\delta^2}(\Psi_{j+1} - 2\Psi_j + \Psi_{j-1}) + 4\frac{\alpha^2}{\delta^2}\Psi_j^3 = \Psi_j. \quad (16)$$

После замены переменной  $\Psi_j = y_j \delta/\alpha\sqrt{2}$  и перехода к непрерывному пределу, получаем обыкновенное дифференциальное уравнение

$$y'' = y + 2y^3, \quad (17)$$

решением которого является  $y = 1/\cosh(x)$ . После обратного перехода к функции  $\Psi$  и использовании условия нормировки волновой функции в интегральном виде  $\delta = \alpha^2$ , получаем выражение для полярона большого радиуса

$$\Psi(x) = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \frac{1}{\cosh(\alpha^2 x)}. \quad (18)$$

Поскольку, согласно (6), относительные смещения выражаются через амплитуды волновой функции  $q_j = -2\alpha\Psi_j\Psi_{j+1}$ , то приближенное выражение для относительных смещений узлов решетки есть

$$q(x) = -\frac{\alpha^3}{\cosh^2(\alpha^2 x)} \quad (19)$$

Радиус континуального полярона  $R = 1/\alpha^2$ , а амплитуды волновой функции и относительных смещений равны  $B = \alpha/\sqrt{2}$  и  $A = \alpha^3$ , соответственно. Сравнение энергии и радиуса полярона, полученных из приближенных выражений для континуального полярона и полученных численным методом, показывает очень хорошее согласие для значений  $\alpha \leq 0.4$ . Естественно, что для решеточного полярона в выражениях (18)–(19) непрерывную переменную  $x$  нужно заменить на дискретную переменную  $j$ . Отметим, что солитонное решение похожего вида было получено ранее для полярона Холстейна [50].

### 3. Модель Су–Шриффера–Хигера для движущегося полярона на гармонической решетке

Рассмотрим теперь движущийся полярон на гармонической решетке с электрон-фононным взаимодействием, описываемым в приближении SSH. Эволюционные уравнения выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \ddot{x}_j &= x_{j+1} - 2x_j + x_{j-1} + \alpha [(\Psi_j\Psi_{j+1}^* + \Psi_j^*\Psi_{j+1}) - (\Psi_{j-1}\Psi_j^* + \Psi_{j-1}^*\Psi_j)] \\ \dot{\Psi}_j &= \frac{i}{\hbar} \{ [1 - \alpha(x_j - x_{j-1})]\Psi_{j-1} + [1 - \alpha(x_{j+1} - x_j)]\Psi_{j+1} \} \end{aligned} \quad (20)$$

где  $\tilde{\hbar}$  – безразмерная постоянная Планка:  $\frac{\hbar}{t_0} \sqrt{\frac{m}{k}} \rightarrow \tilde{\hbar}$ . Типичное значение безразмерной постоянной Планка  $\tilde{\hbar} \sim 10^{-2}$ , и эта величина есть отношение характерных квантовых (время перескока волновой функции) и динамических (наименьший период колебания решетки) времён. Волновая функция в (20) есть комплексная величина. Если из уравнений для  $\ddot{x}_{j+1}$  вычесть уравнения для  $\ddot{x}_j$ , то можно получить уравнения для переменных  $q_j$  и  $\Psi_j$ :

$$\begin{aligned} \ddot{q}_j &= (q_{j+1} - 2q_j + q_{j-1}) + \alpha [(\Psi_{j+1}^*\Psi_{j+2} + \text{c.c.}) - 2(\Psi_j^*\Psi_{j+1} + \text{c.c.}) + (\Psi_{j-1}^*\Psi_j + \text{c.c.})] \\ \dot{\Psi}_j &= \frac{i}{\hbar} [(1 - \alpha q_{j-1})\Psi_{j-1} + (1 - \alpha q_j)\Psi_{j+1}]. \end{aligned} \quad (21)$$

Система уравнений (20) более удобна для численного анализа, тогда как система (21) позволяет провести аналитические исследования. И нашей целью является сведение дискретных уравнений (21) к континуальным уравнениям, у которых существуют решения. Для перехода к континуальному пределу нужно от конечных разностей в (21) перейти к производным:

$$\begin{aligned} q_{j\pm 1} &= q_j \pm \varepsilon q'_j + \frac{1}{2} \varepsilon^2 q''_j \pm \dots \\ \Psi_{j\pm 1} &= \Psi_j \pm \varepsilon \Psi'_j + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \Psi''_j \pm \dots, \end{aligned} \quad (22)$$

где  $\varepsilon$  – малый параметр, имеющий размерность длины. Подставляя разложения (22) в (21) и пренебрегая членами порядка  $\varepsilon^3$  и выше, получим систему нелинейных уравнений в частных производных:

$$\begin{aligned} q_{tt} &= q_{xx} + 2\alpha(\Psi\Psi^*)_{xx} \\ \Psi_t &= \frac{i}{\hbar} [2(1 - \alpha q)\Psi + \Psi_{xx}]. \end{aligned} \quad (23)$$

Система (23) не является точно интегрируемой. Однако можно попытаться найти частное решение этой системы. Если решение существует, то его целесообразно искать в функциональном виде, совпадающем с решением для неподвижного полярона большого радиуса (18)–(19). В этом решении следует заменить  $x \rightarrow x - v_p t$ , то есть искать решение для полярона, движущегося со скоростью  $v_p$ . Итак, будем исследовать пробное решение вида

$$\begin{aligned} q(x, t) &= - \frac{A}{\cosh^2[d(x - v_p t)]} \\ \Psi(x, t) &= \frac{B \exp[i(kx + \omega t)]}{\cosh[d(x - v_p t)]}, \end{aligned} \quad (24)$$

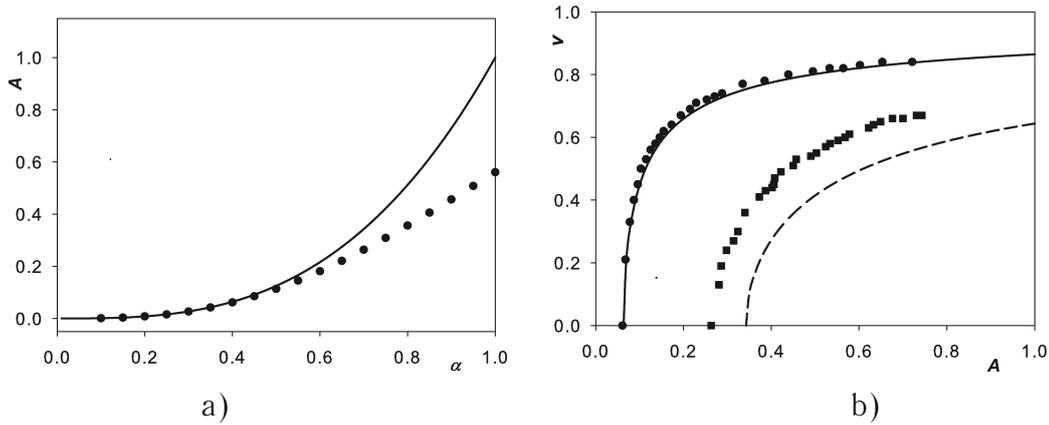
где  $1/d$  – радиус полярона,  $v_p$  – скорость полярона.  $A, B$  – амплитуды относительных смещений частиц и волновой функции, соответственно,  $(kx + \omega t)$  – фаза волновой функции. Все эти параметры пока не определены. Но если подставить пробное решение (24) в исходную систему (23), то выявляется связь между всеми параметрами. Оказывается, что решение солитоноподобное и зависит лишь от одного свободного параметра. Если в качестве свободного параметра выбрать амплитуду относительных смещений  $A$  ( $\alpha$  есть независимый параметр задачи), то остальные параметры (обратное значение радиуса полярона  $d$ , его скорость  $v_p$  и амплитуда волновой функции  $B$ ) выражаются через  $\alpha$  и  $A$  следующим образом:

$$d = \sqrt{\alpha A}; \quad v_p = \sqrt{1 - \sqrt{\alpha^3/A}}; \quad B = \sqrt{d/2}. \quad (25)$$

Параметры фазы волновой функции  $k$  и  $\omega$  имеют вид:

$$k = \tilde{\hbar} v_p / 2 \ll 1; \quad \omega = (2 + d^2 - k^2) / \tilde{\hbar} \gg 1. \quad (26)$$

Решение (24) с учетом (25) переходит в решение для неподвижного полярона. Действительно, из  $v_p = 0$  в (25) следует, что  $A = \alpha^3$ , и подстановка этого соотношения в выражение для  $d$  дает  $d = \alpha^2$ , что в точности совпадает с выражением для обратного радиуса неподвижного полярона (19).



**Рис. 4.** а) Зависимость амплитуды неподвижного полярона от параметра электрон-фононного взаимодействия  $\alpha$ . Сплошная линии – аналитический результат, кружочки – численное моделирование. б) Зависимость скорости полярона от амплитуды  $A$  относительных смещений. Сплошная и пунктирная линии – выражения (25) для  $\alpha = 0.4$  и  $\alpha = 0.7$ , соответственно. Кружочки и квадратики – результаты, полученные численным интегрированием уравнений (20) для тех же значений  $\alpha$ .

Безразмерная скорость звука в гармонической решетке  $v_{\text{snd}} = 1$ , и скорость полярона  $v_p$  меньше скорости звука и заключена в пределах  $0 \leq v_p < 1$ . Из (25) также следует, что  $A \geq \alpha^3$ , то есть минимальную амплитуду  $A = \alpha^3$  имеет неподвижный полярон.

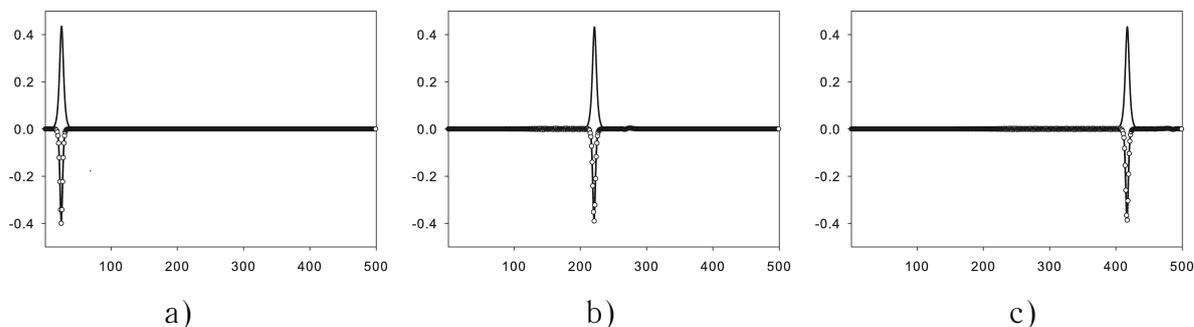
Решение (24) необходимо проверить численным моделированием. Прежде всего определим область значений параметра  $\alpha$ , для которых выполняется континуальное приближение. Для этого будем сравнивать результаты численного моделирования исходной системы (20) с аналитическими предсказаниями согласно (24)–(25).

На рисунке 4а показана зависимость амплитуды неподвижного полярона от параметра электрон-фононного взаимодействия  $\alpha$ . Видно, что для  $\alpha \leq 0.4$  соответствие между численными и аналитическими результатами очень хорошее, а для бóльших значений  $\alpha$  наблюдается расхождение, которое возрастает с увеличением параметра  $\alpha$ . Это означает, что для  $\alpha \leq 0.4$  континуальная система (24) может с хорошей точностью описать динамику исходной дискретной задачи.

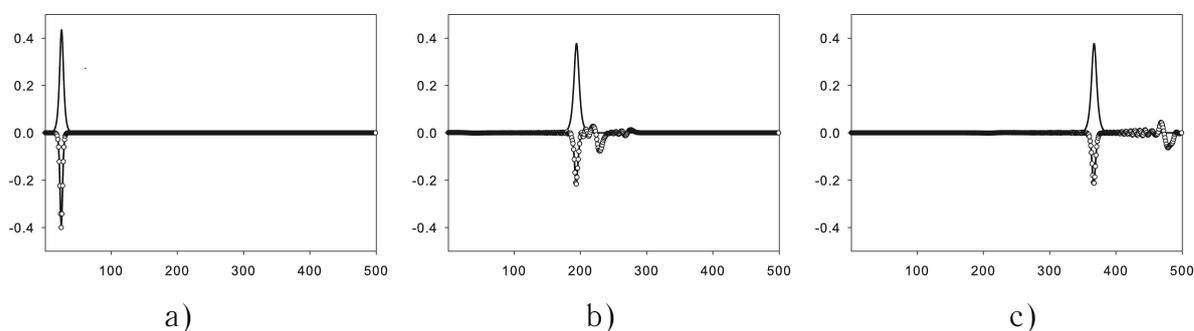
На рисунке 4б показаны зависимости скорости полярона  $v_p$  от амплитуды относительных смещений  $A$  для двух значений параметра  $\alpha$ . Видно, что для  $\alpha = 0.4$  совпадение численных и аналитических результатов хорошее, тогда как для  $\alpha = 0.7$  численная и аналитическая кривые несколько различаются. Заметим, что для  $\alpha = 0.7$  численные результаты ложатся на некоторую кривую. Это может означать, что для бóльших значений  $\alpha$  движущиеся поляроны действительно существуют, но они не описываются в рамках континуального приближения.

Анализ устойчивости полученных решений проводился численно для значений параметра электрон-фононного взаимодействия  $\alpha = 0.4$ . На рис. 5 показаны несколько “фотографий” при движении полярона по решетке. Начальное условие выбрано в виде (24) с (25) для волновой функции и в виде  $x_{i+1} = x_i + q_i$  для координат ( $x_1 = 0$ ) с амплитудой  $A = 0.4$ . Тогда из (25) следует, что начальная скорость полярона  $v_p \approx 0.775$ .

Видно, что полярон очень устойчив и при своем движении сохраняет свои



**Рис. 5.** Форма и положение полярона в моменты времени  $t = 0$  (a),  $t = 250$  (b) и  $t = 500$  (c). При  $t = 0$  полярон центрирован на узле  $j_0 = 25$ . Положительные значения по оси ординат – модуль волновой функции  $|\psi_j|$ , отрицательные значения – относительные смещения частиц  $q_j$ .  $N = 500$ .



**Рис. 6.** Форма и положение полярона в моменты времени:  $t = 0$  (a),  $t = 250$  (b) и  $t = 500$  (c). При  $t = 0$  полярон центрирован на узле  $j_0 = 25$ .  $N = 500$ . Обозначения те же, что и на рис. 5.

параметры – амплитуды относительных смещений и волновой функции. В результате эволюции при численном моделировании за время  $t = 500$  амплитуда сохраняется с очень хорошей точностью  $A \approx 0.4$ , и скорость, полученная в численном моделировании, также с очень хорошей точностью соответствует расчетной,  $v_p \approx 0.78$ . Полярон оказывается очень устойчивым при численном моделировании и с другими начальными условиями, удовлетворяющими (24)–(25).

Если начальные условия не в точности соответствуют выражениям (25), то возникает вопрос относительно того, во что превращаются “неправильные” начальные условия в процессе эволюции. С целью ответить на этот вопрос начальное условие было задано в виде  $\alpha = 0.4$ ,  $A = 0.4$  и  $v_p = 0.2$ , которое не соответствует (25). Оказалось (см. рис. 6), что довольно быстро формируется полярон с параметрами  $A \approx 0.21$  и скоростью  $v_p \approx 0.68$ , что с очень хорошей точностью соответствует соотношениям (25). Сформировавшийся полярон в дальнейшем оказывается очень устойчивым.

Самоорганизуясь под правильное решение, полярон “сбрасывает” с себя все лишнее, что не соответствует точному решению. И это “лишнее” превращается в колебательные флуктуации решетки (на рис. 6 эти колебания движутся со скоростью звука и обгоняют полярон). Были проверены разные способы задания начальных условий, и всегда решение выходило на стационарный режим.

Система уравнений (23) не относится к классу точно решаемых моделей, и решение (24) является частным устойчивым решением этой системы. Тем не менее для рассматриваемой системы (23) существует прием, позволяющий свести систему уравнений к точно решаемому виду.

#### 4. Приведение системы уравнений (23) к точно решаемому виду

Хотя полученные решения (24) хорошо описывают поведение полярона при значениях параметра  $\alpha \leq 0.4$ , тем не менее мы рассмотрим способ, позволяющий свести систему (23) к точно решаемому виду. Для удобства перепишем систему уравнений, которую будем исследовать, еще раз:

$$\begin{aligned} q_{tt} &= q_{xx} + 2\alpha(\psi\psi^*)_{xx} \\ \psi_t &= \frac{i}{\hbar}[2(1 - \alpha q)\psi + \psi_{xx}]. \end{aligned} \quad (27)$$

При выводе точно интегрируемой системы уравнений мы основываемся на работе [45], в которой получены точные решения нестационарного уравнения Шредингера с самосогласованным потенциалом. В этой работе приведена точно интегрируемая система уравнений (формула (87) с условием самосогласования (88) из работы [45]), к которой мы попытаемся свести исходную систему (27). Для этого нужно понизить степень производной по времени в первом из системы уравнений (27). Это осуществляется с помощью Reductive Perturbation Method [46, 47], в котором производится специальная замена переменных:

$$\begin{aligned} q &= \epsilon u_1 + \epsilon^2 u_2 + \dots \\ y &= \epsilon^{1/2}(x - ct) \\ \tau &= \epsilon^{3/2}t. \end{aligned} \quad (28)$$

Смысл этих преобразований — переход к новым переменным  $q \rightarrow u_1$ ,  $x \rightarrow y$ ,  $t \rightarrow \tau$  с помощью малого параметра  $\epsilon$ . При этом новая система координат движется со скоростью  $c$  относительно старой (вторая строчка в (28)). Подставив (28) в систему (27) и приравнявая члены в разложении при степени  $\epsilon^2$ , получим, что  $c = 1$ . И это означает, что новая лабораторная система координат движется со скоростью звука  $c = v_{\text{snd}} = 1$  относительно старой системы координат.

В следующем порядке малости, приравнявая члены при степени  $\epsilon^3$  и учитывая, что ищется решение, которое стремится к нулю на  $\pm\infty$ , получим

$$\begin{aligned} 2u_\tau &= 2\alpha(\psi\psi^*)_y \\ i\hbar(\psi_\tau - \psi_y) &= -2(1 - \alpha u)\psi - \psi_{yy}. \end{aligned} \quad (29)$$

Хотя порядок производной по времени и понижен до первого, нужно сделать еще несколько замен переменных, чтобы свести систему (29) к стандартному виду, приведенному в [45], и который имеет точные решения. Это осуществляется с помощью простой замены переменных  $\psi(y, \tau) = A\psi(z, T)\exp[i(kz - \omega T)]$ ,  $u(y, \tau) = BU(z, T)$ ,  $\tau = CT$ ,  $y = Dz$ , где  $A, B, C, D$  — некоторые константы. В итоге получим систему уравнений

$$\begin{aligned} U_T &= 2(\psi\psi^*)_z \\ i\psi_T &= U\psi + \psi_{zz}, \end{aligned} \quad (30)$$

в точности совпадающую с формулами (87)-(88) из [45]. Эта система имеет бесконечное множество решений солитонного типа. Простейшее односолитонное решение по виду совпадает с решением (24). Двусолитонные и последующие по возрастанию порядка многосолитонные решения для поляронов не представляют большого практического интереса из-за того, что для их образования необходимо два и более носителя заряда. При этом требуется выполнение некоторых нетривиальных соотношений между дополнительными параметрами решений. Рассмотренный случай поляронов на гармонической решетке и разработанные подходы позволяют перейти к рассмотрению поляронов на нелинейной решетке.

## ДВИЖУЩИЙСЯ ПОЛЯРОН НА НЕЛИНЕЙНОЙ РЕШЕТКЕ

Для описания нелинейного характера взаимодействия между соседними частицами часто используется потенциал Морзе

$$U(q) = D [1 - \exp(-bq)]^2, \quad (31)$$

где  $D$  — глубина потенциальной ямы и  $b$  — параметр жесткости связи, а  $q$  по-прежнему относительное расстояние между частицами. Если этот потенциал разложить в ряд вблизи равновесия до второго порядка, то получится  $U(q) \approx Db^2q^2 - Db^3q^3$ . Это разложение можно переписать в виде

$$U(q) = \frac{(2Db^2)q^2}{2} - \frac{(2Db^2)3b/2}{3}. \quad (32)$$

Выражение в круглых скобках  $(2Db^2)$  есть ничто иное как жесткость гармонической потенциала, которая выше была выбрана в качестве единицы измерения и численно равна единице. Поэтому потенциал (32) можно переписать в виде

$$U(q) = \frac{1}{2}q^2 - \frac{\beta}{3}q^3, \quad (33)$$

где  $\beta = 3b/2$ . В потенциале (33) осталось сделать безразмерным параметр  $\beta$ . Для ДНК типичное значение параметра  $b$  в потенциале Морзе (31)  $b = 1.2 \text{ \AA}^{-1}$  [48]. Согласно определению безразмерных единиц, сделанному выше для ДНК (1 единица длины =  $0.59 \text{ \AA}$ ), безразмерное значение параметра  $\beta$  в потенциале (33) будет  $\beta \approx 1.1$ . Аналогичным образом можно провести обезразмеривание других типов потенциалов (Леннард-Джонс, Тода и др.), разложения которых сводятся к виду (33).

### 5. Движущийся полярон на нелинейной решетке в континуальном пределе

Метод получения решения для движущегося полярона такой же, как и для гармонической решетки. Записывая уравнения для динамических и электронных переменных в дискретном виде и подставляя туда разложения (22), можно получить континуальную систему уравнений:

$$\begin{aligned} q_{tt} &= \left( q_{xx} + \frac{1}{12}q_{xxxx} \right) - \beta (q^2)_{xx} + 2\alpha (\psi\psi^*)_{xx} \\ \psi_t &= \frac{i}{\hbar} [2(1 - \alpha q) \psi - \psi_{xx}]. \end{aligned} \quad (34)$$

К сожалению, коэффициенты в системе (34) таковы, что эта система не сводится к интегрируемой системе известного вида (формулы (87) и (89) из [45]):

$$\begin{aligned} 3u_{tt} &= (u_{xxx} - 6u u_x)_x + 8|\phi|_{xx}^2 \\ i \phi_t &= \phi_{xx} - u \phi. \end{aligned} \quad (35)$$

Однако есть особый случай, когда система (34) все же имеет частное решение. Этот случай реализуется, если в (34)  $\beta = 2\alpha$  (с тем, чтобы коэффициенты перед вторыми производными в правой части (34) были равны). Тогда частное однопараметрическое решение солитонного типа существует и имеет в точности тот же функциональный вид, что и решение для гармонической решетки (24). Однако соотношение между параметрами решения несколько иное:

$$d = \sqrt{\alpha A} = \sqrt{2\beta A}, \quad B = \sqrt{d/2}, \quad (36)$$

и скорость полярона

$$v_p = \left( 1 + \frac{\beta A}{3} - \sqrt{\frac{\alpha^3}{A}} \right)^{1/2} \approx 1 + \frac{\beta A}{6} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\alpha^3}{A}} \quad (37)$$

выражается через параметры модели: электрон-фононное взаимодействие  $\alpha$  и нелинейность потенциала  $\beta$ . Хотя эти параметры и связаны между собой, но в выражении (37) они для ясности записаны раздельно. Амплитуда  $A$  относительных смещений по-прежнему является единственным свободным параметром. Параметры фазы волновой функции такие же, как и в гармонической решетке (26), то есть  $k \sim \hbar \ll 1$  и  $\omega \sim 1/\hbar \gg 1$ .

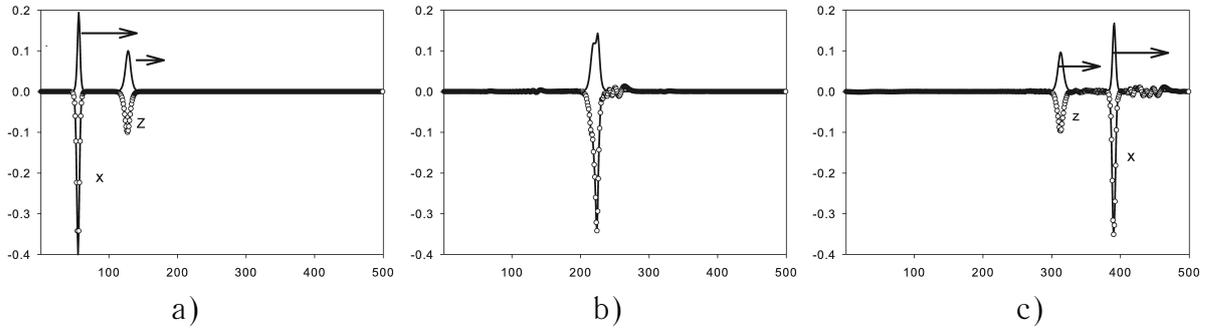
Как видно из (37), скорость полярона содержит две добавки к скорости звука  $c = 1$ . Первая из них положительна. И если электрон-фононное взаимодействие отсутствует ( $\alpha = 0$ ), то оставшееся выражение представляет собой скорость солитона в нелинейной решетке с потенциалом  $\alpha$ -ФПУ [49]. Вторая добавка в отсутствие нелинейности ( $\beta = 0$ ) в точности совпадает со случаем полярона в гармонической решетке (25). Таким образом, в двух предельных случаях получаем правильные ответы.

Также как и для гармонической решетки, нужно определить область применимости и выяснить устойчивость полученных решений. Результаты в точности совпадают с результатами для гармонической решетки (см. рис. 4): полученное континуальное приближение хорошо “работает” для  $\alpha \leq 0.4$ .

Устойчивость полученных решений проверена точно так же, как и для гармонической решетки: полярон, заданный правильными начальными условиями, очень стабилен, а полярон с неправильными начальными условиями быстро самоорганизуется, и его параметры соответствуют условиям (36)–(37).

Дополнительным критерием устойчивости полученных результатов является численный эксперимент по столкновению поляронов. На рис. 7 показано столкновение двух поляронов. Видно, что после столкновения поляроны сохраняют свою индивидуальность, и волновая функция номирована на единицу в каждом из них. Это численное моделирование косвенно подтверждает, что солитонное решение (24) для поляронов принадлежит к классу точно решаемых моделей. Естественно, что проведенный численный эксперимент нефизичен, так как не учитывает кулоновское взаимодействие; его целью является демонстрация точности полученных аналитических выражений и устойчивости решений.

Однако в общем случае нет никаких ограничений на связь между параметрами  $\alpha$  и  $\beta$  и, более того, параметр  $\alpha$  обычно не мал. Например, для ДНК  $\alpha \approx 1.2$ , и  $\beta \approx 1.1$ . Аналитические выражения, полученные в длинноволновом пределе, в этих случаях “не работают”, и остается использовать результаты численного моделирования.



**Рис. 7.** Формы и положения двух поляронов X и Z в моменты времени  $t = 0$  (a),  $t = 200$  (b) и  $t = 400$  (c). При  $t = 0$  поляроны центрированы на узлах  $j_0^X = 56$  и  $j_0^Z = 128$ . Левый полярон X на панели a) имеет бóльшую скоростью по сравнению с правым поляроном Z. На панели b) показан момент столкновения поляронов. На панели c) более быстрый полярон X обогнал более медленный полярон Z. Амплитуда быстрого полярона  $A^X = 0.4$ , амплитуда более медленного полярона  $A^Z = 0.1$ . Параметры:  $\alpha = 0.4$ ,  $\beta = 0.2$ . Решетка  $N = 500$ . Обозначения те же, что и на рис. 5.

## 6. Численное моделирование полярона на нелинейной решетке с произвольными параметрами.

Система уравнений для численного моделирования полярона на нелинейной решетке с потенциалом (33) выглядит следующим образом:

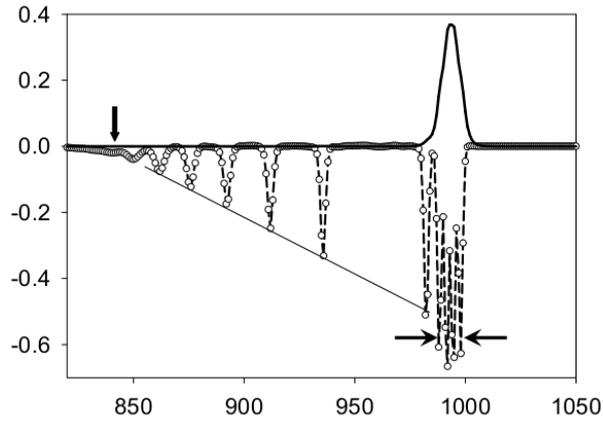
$$\begin{aligned} \ddot{x}_j &= (q_j - q_{j-1}) + \beta(q_{j-1}^2 - q_j^2) + \alpha[(\Psi_j^* \Psi_{j+1} + \text{c.c.}) - (\Psi_{j-1}^* \Psi_j + \text{c.c.})] \\ \dot{\Psi}_j &= \frac{i}{\hbar} [(1 - \alpha q_{j-1}) \Psi_{j-1} + (1 - \alpha q_j) \Psi_{j+1}]; \quad q_j \equiv x_{j+1} - x_j \end{aligned} \quad (38)$$

Численное моделирование эволюции начального состояния проводилось при произвольных значениях параметров  $\alpha$  и  $\beta$ . Само начальное состояние для определенности выбиралось в виде (36)–(37) также с произвольными значениями амплитуды  $A$ , ширины  $1/d$  и скорости  $v_p$ . Начальная волновая функция задавалась как собственная функция потенциальной ямы, образованной деформацией решетки. Целью численного моделирования являлось выяснение возможности образования устойчивых поляронов при задании произвольных начальных условий из той области значений параметров, где не выполняется континуальное приближение.

Оказалось, что поляроны действительно существуют в очень широкой области значений параметров и являются очень устойчивыми. Более того, при некоторых значениях параметров поляроны имеют необычный вид. Приведем несколько примеров.

Итак, выбираем фиксированные значения параметров  $\alpha$  и  $\beta$ . Если для этих значений параметров полярон существует, то он должен самоорганизоваться, подстраивая свои параметры (ширину, скорость и амплитуду) так, чтобы образовать устойчивое образование. И выход на конкретное решение может зависеть от выбора начальных условий.

В первом примере модельная решетка задана в виде  $\alpha = 0.4$ ,  $\beta = 1.0$ . Начальные параметры полярона в выражении (36)–(37) заданы следующими:  $d = 0.1$ ,  $A = 0.6$ ,  $v_p = 0.7$ . После достаточно длинной эволюции ( $t = 800$ ) на решетке с  $N = 1300$  выделилось образование, которое оказалось достаточно устойчивым (см. рис. 8).



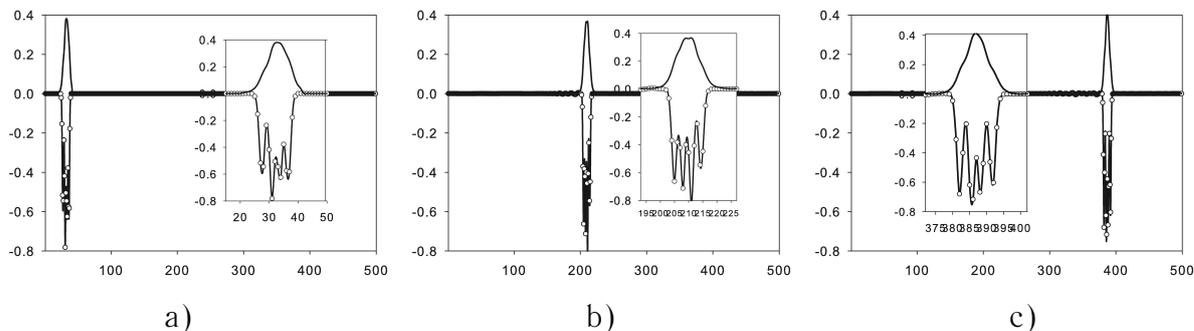
**Рис. 8.** Результат эволюции начального состояния (начальные условия см. в тексте) за время  $t = 800$  на решетке с  $N = 1300$ . Сформировавшийся полярон для ясности заключен между двумя горизонтальными стрелками. Граница распространения звука показана вертикальной стрелкой. В начальный момент полярон центрирован на узле  $j_0 = 50$ . Через вершины шести солитонов проведена прямая линия. Полная энергия и норма волновой функции сохраняются с относительной точностью  $< 10^{-5}$ .

Полученный результат весьма необычен. Во-первых, полярон оказался сверхзвуковым. При этом скорость поларона больше скорости самых быстрых солитонов (через максимумы солитонов на рис. 8 проведена прямая линия, поскольку для солитонов на решетке с  $\alpha$ -FPU потенциалом выполняется линейная связь между скоростью и амплитудой [49]). Во-вторых, у сформировавшегося поларона огибающая относительных смещений частиц не гладкая, а состоит из 4 зубцов. В-третьих, волновая функция на 100% сконцентрирована на полароне, и отщепившиеся солитоны, имеющие хорошо сформированные потенциальные ямы, тем не менее не уносят с собой ни доли волновой функции. По сравнению с исходно заданным полароном, полярон, получившийся в результате эволюции, стал совершенно другим: изменилась скорость, ширина, и даже форма.

Ранее полароны с огибающей состоящей из нескольких зубцов уже наблюдались [50–53] и такие состояния были названы поляробризерами. Правда, поляробризера наблюдались в решетках с другими потенциалами и другим учетом электрон-фононного взаимодействия.

Была исследована устойчивость полученного четырехзубого поляробризера. Начальное состояние было “вырезано” из результата эволюции предыдущего численного эксперимента. Координаты, скорости и волновая функция были взяты из значений заключенных между горизонтальными стрелками на рис. 8. И эти значения были использованы в качестве начальных условий для выяснения устойчивости полученного поларона. Результат показан на рис. 9. Очевидно, что полярон очень устойчив. Он проходит  $\approx 400$  узлов решетки, практически не меняя своих параметров (ширины и амплитуды), и движется с постоянной сверхзвуковой скоростью.

Другой пример показан на рис. 10. Начальное условие такое же как и в предыдущем примере, но начальный полярон более узкий, его ширина  $1/d = 2.0$ . Эволюция этого начального состояния более сложная: существуют промежуточные одно-, дву- и трехзубые полароны. Однако анализ на больших временах показывает, что двузубый полярон является все же основным состоянием при эволюции с выбранными



**Рис. 9.** “Фотографии” поляробризера в разные моменты времени. На вставках к рисункам поляроны для ясности показаны в измененном масштабе.  $N = 500$ . Оси координат и обозначения те же, что и на рис. 5.

начальными условиями. Этот полярон также, превращаясь в устойчивое образование, существенно поменял свою ширину, скорость и форму. Его ширина  $\approx 7$ , а скорость близка к звуковой.

Еще одним примером, подтверждающим устойчивость поляронных решений, является численный эксперимент по столкновению поляронов. На рис. 11 показан результат столкновения двух одинаковых четырехзубых поляробризеров, движущихся навстречу друг другу. Видно, что после столкновения поляроны проходят друг сквозь друга и сохраняют свою форму. Нормировка волновой функции для каждого из поляронов также сохраняется и равна единице (параметры обоих поляронов такие же, как на рис. 7-8).

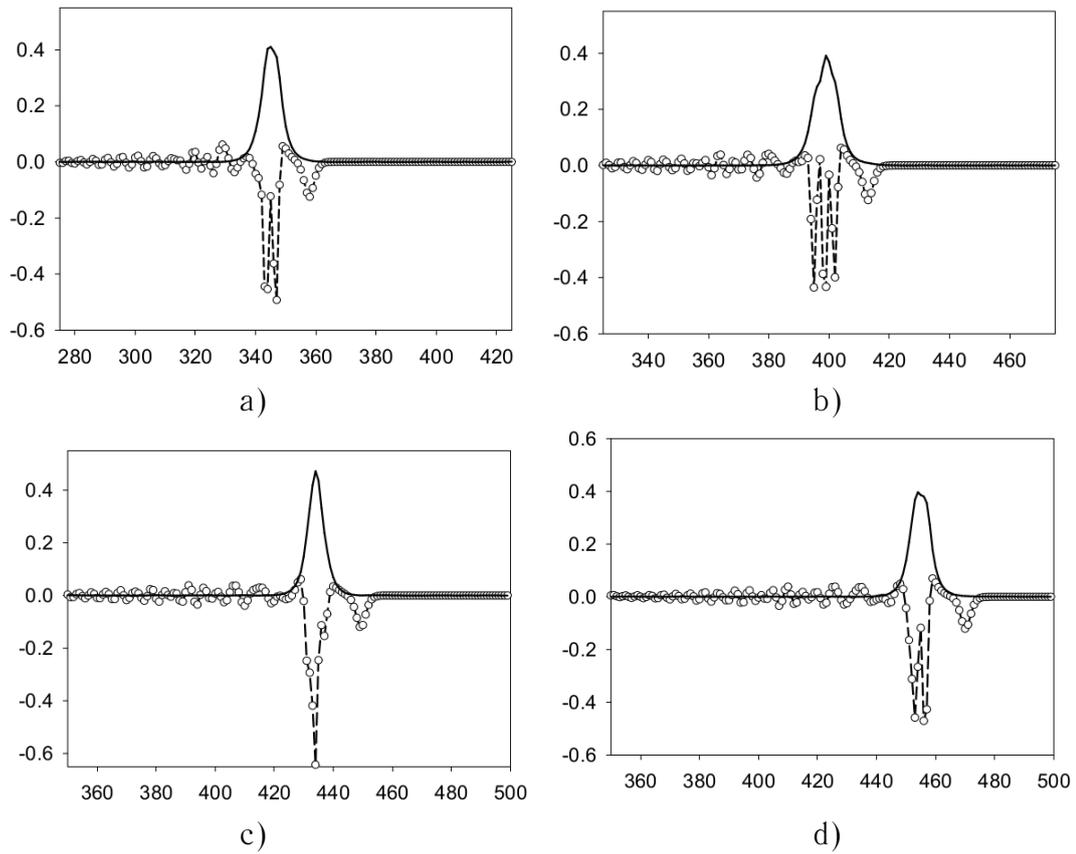
И рассмотрим, наконец, область параметров  $\alpha$  и  $\beta$ , характерных для ДНК:  $\beta = 1.1$  и  $\alpha = 1.2$ . При этих значениях параметров для всех начальных условий всегда получается обычный полярон с гладкой огибающей. На рис. 12 показаны примеры эволюции полярона с разными начальными условиями.

Вне зависимости от типа начальных условий, решение всегда выходит на стационарное решение со скоростью меньше или порядка скорости звука. При этом довольно странно, что все “лишнее”, что не соответствует правильным начальным условиям для полярона, чаще всего выделяется в виде солитонов, а не в виде случайных колебаний решетки. При использовании разнообразных начальных условий формируются устойчивые поляроны с разными амплитудами и скоростями, вплоть до неподвижных поляронов.

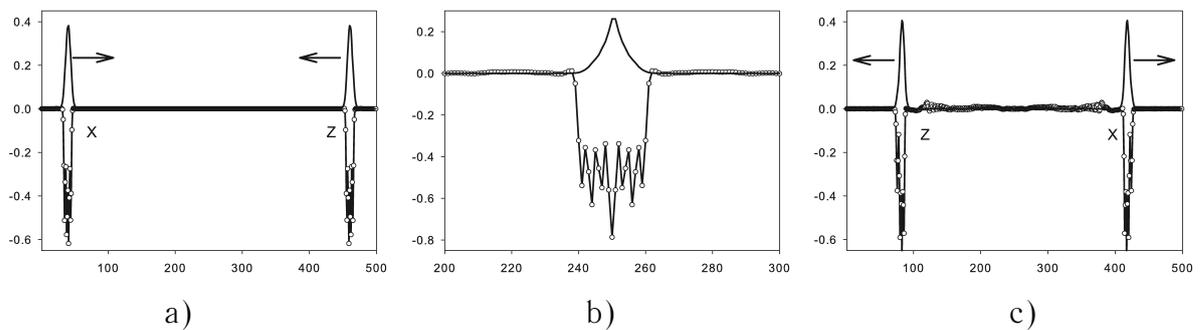
Приведенные выше результаты эволюции поляронов на нелинейной решетке показывают большое разнообразие форм полярона в зависимости от параметров задачи (параметр нелинейности решетки  $\beta$  и электрон-фононное взаимодействие  $\alpha$ ). Конечное состояние (форма полярона и его скорость) также сильно зависит от выбора начальных условий. Эта особенность характерна для моделей, описываемых нелинейными уравнениями в частных производных.

## 7. Образование и время жизни поляронов

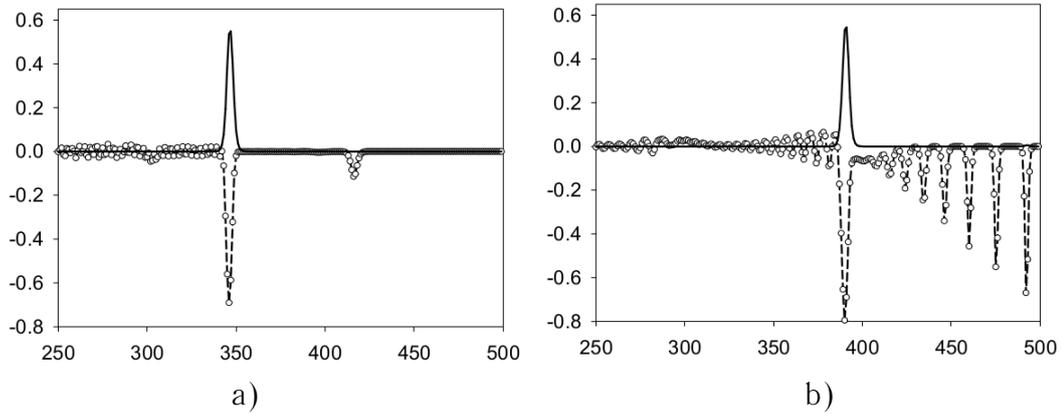
До сих пор исследовалась эволюционная динамика поляронов в предположении, что, во-первых, в результате эволюции из тех или иных начальных условий полярон уже сформирован, то есть его форма и скорость заданы, и, во-вторых, температура решетки равна нулю. Однако возникают вопросы относительно механизмов формирования поляронов и времени их жизни при конечных температурах. В той или иной степени



**Рис. 10.** Эволюция двузубого полярона в разные моменты времени:  $t = 21$  (a),  $t = 345$  (b),  $t = 380$  (c),  $t = 400$  (d).



**Рис. 11.** Столкновение двух одинаковых четырехзубых поляронов. На панели а) показаны начальные условия: левый полярон (X) центрирован при  $t = 0$  на узле  $j_0^X = 40$  и движется направо с начальной сверхзвуковой скоростью  $v_0^X = 1.14$ ; правый полярон (Z) центрирован при  $t = 0$  на узле  $j_0^Z = 460$  и движется налево с начальной скоростью  $v_0^Z = -1.14$ . На панели б) показана “фотография” момента столкновения поляронов при  $t = 250$ . На панели с) показано положение поляронов после столкновения: полярон X продолжает двигаться направо, а полярон Z — налево. Решетка  $N = 500$ .



**Рис. 12.** Результаты эволюции начальных состояний полярона с параметрами  $A = 0.6$ ,  $d = 0.4$ ,  $v_p^0 = 1.0$  (Рис. а);  $A = 0.6$ ,  $d = 0.1$ ,  $v_p^0 = 0.8$  (Рис. б) на решетке с параметрами  $\alpha = 1.2$ ,  $\beta = 1.1$   $N = 500$ . Все “фотографии” сделаны в момент времени  $t = 350$ . Сформировавшиеся скорости поляронов:  $v_p \approx 0.7$  и  $v_p \approx 0.53$

подобные вопросы уже рассматривались [54–59]. Мы рассмотрим несколько частных случаев образования поляронов и оценим их время жизни.

В динамике поляронов существуют две взаимосвязанные подсистемы: “быстрая” квантовая подсистема в которой характерное время  $t_Q$  определяется временем перескока заряда между соседними узлами решетки, и “медленная” динамическая подсистема с характерным временем порядка периода колебания решетки  $t_D$ . Обычно  $t_D$  на два порядка больше по сравнению с  $t_Q$  (во втором уравнении в системе (38) можно считать, что безразмерная постоянная Планка  $\tilde{\hbar}$  перенормирует единицы времени для квантовой подсистемы, и величина  $\tilde{\hbar} \sim 10^{-2}$  как раз и есть отношение характерных времён).

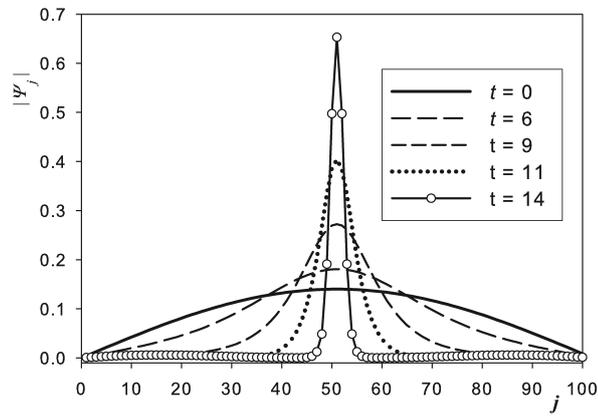
Есть некоторая вероятность того, что если заряд в результате переноса с донора окажется локализованным на одном узле решетки, то решетка не успеет самоорганизоваться с образованием полярона из-за того, что волновая функция заряда очень быстро “размажется” по решетке. Мы исследовали формирование поляронов, исходя из нескольких типов начальных условий. Если начальная комплексная волновая функция выбрана в виде  $\Psi_j(t = 0) = \exp(i\varphi)\delta_{j,j_0}$ , то есть локализован на узле  $j_0$  с произвольной фазой  $\varphi$ , то волновая функция очень быстро размывается по решетке, и полярон не образуется. Возможно, что на очень больших временах полярон все же сформируется, но с точки зрения переноса заряда это уже не представляет большого интереса.

Второй возможный тип начальных условий — когда заряд перенесен на решетку “адиабатически”, и когда волновая функция является собственной функцией недеформированной решетки, то есть

$$\Psi_j(t = 0) = \exp(i\varphi) \left[ \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin\left(\frac{\pi j}{N+1}\right) \right].$$

В этом случае полярон образуется за время порядка нескольких периодов колебаний решетки (см. рис. 13)

Если выбрать волновую функцию, соответствующую первому возбужденному



**Рис. 13.** Формирование полярона из начального условия, соответствующего волновой функции основного состояния электрона на решетке. Показаны “фотографии” полярона в процессе его эволюции в разные моменты времени (показаны на вставке к рисунку). При  $t = 14$  полярон полностью сформирован.

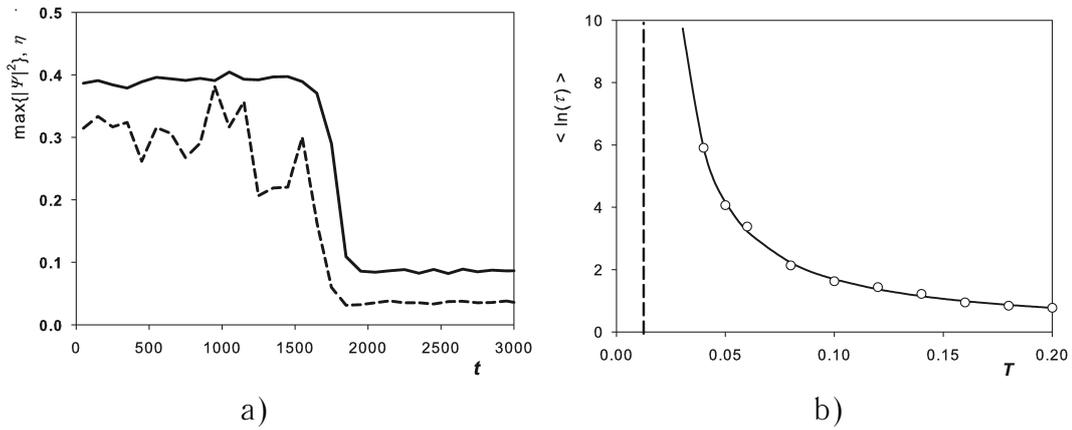
состоянию, то есть

$$\psi_j^1(t=0) = \exp(i\varphi) \left[ \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin\left(\frac{2\pi j}{N+1}\right) \right],$$

то образуются два полярона с нормировкой волновой функции, равной 0.5 на каждом из них. За счет слабого обменного взаимодействия, экспоненциально убывающего с расстоянием между поляронами, поляроны притягиваются, и на больших временах образуют единый полярон.

Следующий вопрос касается времени жизни полярона при конечных температурах. Задача решалась следующим образом. Рассматривалась однородная цепочка конечной длины. В центре цепочки формировался неподвижный полярон. Затем цепочка термализовалась с концов с помощью ланжевеновских случайных сил с трением. Через некоторое время, если температура оказывалась достаточно высокой, полярон разрушался. Следили за максимальным значением квадрата модуля амплитуды на всей решетке  $\max|\psi_j|^2$ , вычисляя его среднее значение за время  $t = 0.5$ . Сначала этот максимум равен  $\sim 0.4$  (что приблизительно соответствует квадрату максимальной амплитуды для покоящегося полярона). Затем, в какой-то момент времени максимум начинает уменьшаться и падает до значения  $\sim 0.1$ , что соответствует разрушению полярона и “размазыванию” волновой функции по решетке. Этот момент и считался временем жизни полярона. Это поведение показано на рис. 14а. Для сравнения на этом же рисунке пунктиром показана величина  $\eta = \sum_{j=1}^N |\psi_j|^4$  (если возбуждение локализовано на одном узле, то  $\eta = 1$ ; если возбуждение равномерно распределено по всей решетке длиной  $N$ , то  $\eta = 1/N$ ). Величину, обратную  $\eta$ , часто называют радиусом квантового возбуждения на решетке. Выбранный критерий времени жизни полярона, определенный через  $\max|\psi_j|^2$  оказывается более точным по сравнению с  $\eta$ -критерием.

При уменьшении температуры время жизни полярона возрастало. На рис. 14б показана зависимость времени жизни полярона  $\tau$  от температуры. Зависимость времени жизни полярона от температуры хорошо описывается выражением  $\ln(\tau) = aT/(T - T_0)$ , где  $a \approx 8.97$  и  $T_0 \approx 0.016$ .



**Рис. 14.** а) Зависимость величин  $\max|\psi_j|^2$  (сплошная линия) и  $\eta$  (пунктир) от времени. Время жизни полярона определяется по резкому уменьшению значения  $\max|\psi_j|^2$  (на рисунке это соответствует  $t \approx 1800$ ). Температура решетки  $T = 0.1$ . б) Зависимость времени жизни полярона  $\tau$  от температуры  $T$  в полулогарифмическом масштабе. Каждая точка получена усреднением по 20 независимым траекториям. Среднеквадратичная ошибка  $\approx 0.5$ . Пунктир — асимптотическое значение температуры  $T_0 = 0.016$  в зависимости  $\ln(\tau) = aT/(T - T_0)$ . Температура измеряется в единицах энергии  $t_0$  (см. (3)).

## 8. Несколько частных случаев эволюции полярона на решетке конечной длины

В предыдущих разделах рассмотрены случаи поляронов на бесконечной решетке. Если интересоваться приложениями предложенного подхода к некоторым практическим задачам, например, переносу заряда в ДНК, то приходится иметь дело с системами ограниченной длины  $N \leq 100$ . И в этих ситуациях есть ряд особенностей, отличающих динамику полярона на бесконечной решетке от динамики на решетке ограниченной длины. Кроме того, есть весьма любопытные частные случаи эволюции волновой функции. Некоторые примеры рассмотрены ниже.

Во-первых, отметим интересное свойство эволюционных уравнений (38). Оказывается, что при некоторых начальных условиях взаимодействие электрона с решеткой носит “односторонний” характер: есть влияние решетки на поведение волновой функции через параметры электрон-фононного взаимодействия, но нет обратного “поляронного” действия электрона на динамику решетки. Другими словами, добавочные силы, действующие на частицы со стороны электронной подсистемы, равны нулю. В простейшем случае это реализуется, если в начале волновая функция электрона полностью локализована на одном узле. Положим для определенности, что волновая функция полностью локализована на произвольном узле  $j_0$  и действительна, то есть  $\psi_{j_0}(t = 0) = (1, 0)$ . Тогда из (38) следует, что на всех соседних узлах волновая функция чередуется с чисто мнимой на действительную. Пусть, например, на четных узлах волновая функция действительная, а на нечетных — мнимая. Тогда очевидно, что вклад в силы, действующие на частицы со стороны заряда (первое уравнение (38)) будет нулевым. Однако решетка влияет на эволюцию волновой функции (второе уравнение (38)). Естественно, что это справедливо и в том случае, когда начальная волновая функция комплексна:  $\psi_{j_0}(t = 0) = \exp(i\varphi)\delta_{j,j_0}$ . Случай начального состояния волновой функции, локализованной на одном узле, подробно рассмотрен в работах [60, 61] и

назван “электронным пинг-понгом” из-за того, что волновая функция многократно отражается от концов решетки и вновь локализуется после отражений. По-другому это явление иногда называется эхом Лошмидта. Нетрудно видеть, что сказанное выше остается справедливым, если начальное состояние устроено так, что на нечетных узлах волновая функция вещественна, а на четных — мнимая (или наоборот).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе подробно исследованы поляроны на одномерной решетке в модели Су-Шриффера-Хигера, когда электрон-фононное взаимодействие линейно по относительным смещениям соседних частиц. Сначала рассмотрена решетка с гармоническим потенциалом взаимодействия между соседними частицами. Для этой решетки получены выражения для неподвижного полярона. Для произвольного значения параметра электрон-фононного взаимодействия  $\alpha$  получены аналитические выражения, которые хорошо описывают свойства полярона, — энергию и радиус. Когда параметр  $\alpha$  мал, то полярон имеет большой радиус, и его свойства хорошо описываются в континуальном приближении.

Для гармонической решетки также получено решение для движущегося полярона, вид которого совпадает с односолитонным решением для решетки с потенциалом Ферми-Паста-Улама (ФПУ). Континуальные уравнения, описывающие движущийся полярон, удается свести к точно решаемой модели, у которой есть семейство многосолитонных решений, и односолитонное решение имеет тот же вид, что и решение для решетки ФПУ.

Для ангармонической решетки с безразмерным потенциалом ФПУ  $U(q) = q^2/2 - \beta q^3/3$  для частного случая соотношения между параметрами  $\alpha = 2\beta$  в континуальном пределе получена система уравнений в частных производных, которая является точно интегрируемой и имеет многосолитонные решения. Однопараметрическое односолитонное решение имеет в точности тот же вид, что и решение для гармонической решетки. При тех значениях параметров, когда континуальное приближение неприменимо, численными методами получены устойчивые решения. Если параметр нелинейности в потенциале взаимодействия достаточно большой, то нелинейность решетки оказывается доминирующей, и поляронное решение является поляробризером с огибающей, состоящей из нескольких зубцов. Для значений параметров, характерных для ДНК, поляронное решение имеет гладкую огибающую.

Поляронные решения — с гладкой огибающей и поляробризеры,— существуют в широкой области значений параметров и являются очень устойчивыми. Эти поляроны достаточно быстро возникают в процессе эволюции из разных типов начальных условий. Если начальные условия на ангармонической решетке в точности не соответствуют правильным параметрам полярона (амплитуда, ширина, скорость), то возникновение поляронов сопровождается появлением “мусора”. И довольно странно, что во многих случаях этим мусором являются солитоны Кортевега—де Вриза, а не хаотические колебания решетки.

Первоначальной целью настоящей статьи являлась попытка объяснения высокой вероятности переноса заряда в ДНК. Однако полученные результаты, в особенности высокая устойчивость поляронных решений в широкой области значений параметров модели, могут оказаться полезными и для описания транспорта заряда и энергии в других системах.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gorodetsky A.A., Buzzeo M.C., Barton J.K. *Bioconjugate Chem.* 2008. V. 19. P. 2285–2296.
2. Mallajosyula S.S., Pati S.K. *J. Phys. Chem. Lett.* 2010. V. 1. P. 1881–1894.
3. Genereux C.G., Boal A.K., Barton J.K. *J. Am. Chem. Soc.* 2010. V. 132. P. 891–905.
4. Cordes M., Giese B. *Chem. Soc. Rev.* 2009. V. 38. P. 892–901.
5. Kawai K., Kodera H., Osakada Y., Majima T. *Nature Chem.* 2009. V. 1. P. 156–159.
6. Mitra A., Aleiner I., Millis A.J. *Phys. Rev. B.* 2004. V. 69. P. 245302.
7. Cornaglia P.S., Grepel D.R., Ness H. *Phys. Rev. B.* 2005. V. 71. P. 075320.
8. Nuñez Regueiro M.D., Cornaglia P.S., Usaj G., Balseiro C.A. *Phys. Rev. B.* 2007. V. 76. P. 075425.
9. Hameau S., Guldner Y., Verzelen O., Ferreira R., Bastard G., Zeman J., Lemaitre A., Gérard J.M. *Phys. Rev. Lett.* 1999. V. 83. P. 4152–4155.
10. Muljarov E.A., Zimmermann R. *Phys. Rev. Lett.* 2004. V. 93. P. 237401.
11. Hohenadler M., Fehske H. *J. Phys. Condens. Matter.* 2007. V. 19. P. 255210.
12. Hohenadler M., Littlewood P.B. *Phys. Rev. B.* 2007. V. 76. P. 155122.
13. LeRoy B., Lemay S., Kong J., Dekker C. *Nature (London).* 2004. V. 432. P. 371–374.
14. Shen X.Y., Dong B., Lei X.L., Horing N.J.M. *Phys. Rev. B.* 2007. V. 76. P. 115308.
15. Heeger A., Kivelson S., Schrieffer J.R., Su W.-P. *Rev. Mod. Phys.* 1988. V. 60. P. 781–850.
16. Gershenson M.E., Podzorov V., Morpurgo A.F. *Rev. Mod. Phys.* 2006. V. 78. P. 973–989.
17. Coropceanu V., Cornil J., da Silva D.A., Olivier Y., Silbey R., Brédas J. *Chem. Rev.* 2007. V. 107. P. 926–952.
18. Grozema F., Siebbeles L.D.A. *Int. Rev. Phys. Chem.* 2008. V. 27. P. 87–138.
19. Ortmann F., Bechstedt F., Hannewald K. *New J. Phys.* 2010. V. 12. P. 023011.
20. Stafström S. *Chem. Soc. Rev.* 2010. V. 39. P. 2484–2499.
21. Lakhno V.D. *Solid State Commun.* 2012. V. 152. P. 621–623.
22. Bussmann-Holder A., Keller H. de Leon J.M. Simon A., Bishop A.R., Muller K.A. *J. Superconductivity & Novel Magnetism.* 2010. V. 23. P. 295–299.
23. Lee B.S. *J. Superconductivity & Novel Magnetism.* 2010. V. 23. P. 333–338.
24. Bussmann-Holder A., Keller H. *J. Superconductivity & Novel Magnetism.* 2009. V. 22. P. 123–129.
25. Genereux J.C., Barton J.K. *Chem. Rev.* 2010. V. 110. P. 1642–1662.
26. Genereux J.C., Wuerth S.M., Barton J.K. *J. Am. Chem. Soc.* 2011. V. 133. P. 3863–3868.
27. Arikuma Y., Nakayama H., Morita T., Kimura S. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2010. V. 49. P. 1800–1804.
28. Augustyn K.E., Genereux J.C., Barton J.K. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007. V. 46. P. 5731–5733.
29. Barton J.K., Olmon E.D., Sontz P.A. *Coordin. Chem. Rev.* 2011. V. 255. P. 619–634.
30. Slinker J.D., Muren N.B., Renfrew S.E., Barton J.K. *Nature Chemistry.* 2011. V. 3. P. 228–233.
31. Астахова Т.Ю., Лихачев В.Н., Виноградов Г.А. *Успехи химии.* 2012. Т. 81. С. 994–1010.
32. Lakhno V.D. *Intern. J. Quant. Chem.* 2010. V. 110. P. 127–137.
33. Holstein T. *Ann. Phys.* 1959. V. 8. P. 325–342.
34. Su W.P., Schrieffer J.R., Heeger A.J. *Phys. Rev. Lett.* 1979. V. 42. P. 1698–1701.

35. Mozafari E., Stafström S. *Phys. Lett. A*. 2012. V. 376. P. 1807–1811.
36. Maniadis P., Kalosakas G., Rasmussen K.Ø., Bishop A.R. *Phys. Rev. B*. 2003. V. 68. P. 174304.
37. Alexandre S.S., Artacho E., Soler J.M., Chacham H. *Phys. Rev. Lett.* 2003. V. 91. P. 108105.
38. Iguchi K. *Int. J. Mod. Phys. B*. 2003. V. 17. P. 2565–3578.
39. Lakhno V.D. *Physics of Particles and Nuclei Letters*. 2008. V. 5. P. 231–235.
40. Wang Y., Fu L., Wang K.-L. *Biophysical Chemistry*. 2006. V. 119. P. 107–114.
41. Conwell E.M., Rakhmanova S.V. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 2000. V. 97. P. 4556–4560.
42. Conwell E.M., Basko D.M. *J. Am. Chem. Soc.* 2001. V. 123. P. 11441–11445.
43. Conwell E.M. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 2005. V. 102. P. 8795–8799.
44. Kalosakas G., Aubry S., Tsironis G.P. *Phys. Rev. B*. 1998. V. 58. P. 3094–3104.
45. Дубровин Б.А., Маланюк Т.М., Кричевер И.М., Маханьков В.Г. *Физика элементарных частиц и атомного ядра*. 1988. Т. 19. С. 579–621.
46. Sasaki K. *Progr. Theor. Phys.* 1981. V. 65. P. 1787–1797.
47. Leblond H. *J. Phys. B*. 2008. V. 41. P. 043001.
48. Hennig D., Chetverikov A.P., Velarde M.G., Ebeling W. *Phys. Rev. E*. 2007. V. 76. P. 046602.
49. Remoissenet M. *Waves Called Solitons. Concepts and Experiment*. Berlin: Springer, 1996. 260 p.
50. Kalosakas G., Aubry S. *Physica D*. 1998. V. 113. P. 228–232.
51. Cuevas J., Kevrekidis P.G., Frantzeskakis D.J., Bishop A.R. *Phys. Rev. B*. 2006. V. 74. P. 064304.
52. Aubry S. In: *Polarons in Advanced Materials*. Springer Series in Materials Science, 2007. V. 103. P. 311–371.
53. Cruzeiro-Hansson L., Eilbeck J.C., Marin J.L., Russell F.M. *Physica D*. 2000. V. 142. P. 101–112.
54. Лахно В.Д., Коршунова А.Н. *Математическая биология и биоинформатика*. 2010. Т. 5. С. 1–29. URL: [http://www.matbio.org/downloads\\_en/Lakhno\\_en2010\(5\\_1\).pdf](http://www.matbio.org/downloads_en/Lakhno_en2010(5_1).pdf) (дата обращения: 20.05.2013).
55. Fehske H., Wellein G., Bishop A.R. *Phys. Rev. B*. 2011. V. 83. P. 075104.
56. Wu J.A., Walker V.E.J., Boyd R.J. *J. Phys. Chem. B*. 2011. V. 115. P. 3136–3145.
57. Wu C.Q., Qiu Y., An Z., Nasu K. *Phys. Rev. B*. 2003. V. 68. P. 125416.
58. Li G., Movaghar B., Ratner M.A. *Phys. Rev. B*. 2013. V. 87. P. 094302.
59. Li G., Movaghar B., Nitzan A., Ratner M.A. *J. Chem. Phys.* 2013. V. 138. P. 044112.
60. Likhachev V.N., Astakhova T.Yu., Vinogradov G.A. *Cornell University Library*. ArXiv:1302.2777.
61. Likhachev V.N., Astakhova T.Yu., Vinogradov G.A. *Cornell University Library*. ArXiv:1302.2779.

Материал поступил в редакцию 03.05.2013, опубликован 26.06.2013.