

УДК: 519.6, 51-7

Особенности движения полярона в молекулярных полинуклеотидных цепочках конечной длины при наличии в цепочке локализованных возбуждений

©2017 Коршунова А.Н.* , Лахно В.Д.**

*Институт математических проблем биологии Российской академии наук, Пущино,
Московская область, Россия*

Аннотация. На основе модели Пейрарда–Бишопа–Холстейна проведены численные эксперименты, демонстрирующие возможность переноса заряда поляронами в однородной незамкнутой G/C цепочке ДНК за счёт взаимодействия с локализованными возбуждениями при отсутствии электрического поля в цепочке. Показано, что, в зависимости от параметров выбранных начальных возбуждений и от параметров цепочки, полярон может двигаться на большие расстояния (около тысячи сайтов). Показано также, что способность полярона двигаться и характер этого движения в значительной степени зависят от взаимного расположения полярона и выбранных локализованных возбуждений.

Ключевые слова: ДНК, нанобиоэлектроника, полярон, модель Пейрарда-Бишопа-Холстейна, подвижность.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время большое количество теоретических работ посвящено исследованию транспорта заряда в ДНК [1]–[7]. Основная цель этих исследований – построение теоретических основ для создания нанобиоэлектронных устройств, в том числе нанопроводов, способных эффективно переносить заряд на большое расстояние [8]–[12]. Основным носителем тока в однородных синтетических полинуклеотидных последовательностях считается полярон [13, 14, 15, 16]. Поляронный перенос заряда исследовался при воздействии температурных флуктуаций [17, 18], в постоянном и переменном электрических полях [19]–[23], при импульсном силовом воздействии [24, 25]. В ряде работ рассматривался перенос заряда как в однородных, так и в регулярных цепочках ДНК [26, 27]. В данной работе мы исследуем возможности минимальными усилиями заставить полярон двигаться по цепочке на максимально большое расстояние.

В работе [28] нами было показано, что полярон, помещённый в начальный момент времени не в центр цепочки, приобретает способность двигаться при отсутствии электрического поля и дополнительных возбуждений в цепочке. Как в статье [28], так и в данной работе, моделирование движения полярона выполнялось на основе модели Пейрарда–Бишопа–Холстейна (ПБХ). Обе статьи представляют исследование движения полярона при отсутствии внешнего электрического поля в цепочке. В

*alya@impb.ru

**lak@impb.psn.ru

отличии от работы [28], в данной работе рассматривается поляронный перенос заряда в результате взаимодействия полярона с внешними локализованными возбуждениями сайтов в начальный момент времени. Мы использовали локализованные возбуждения сайтов, которые, при отсутствии полярона в цепочке, не перемещаются по цепочке, а лишь растекаются по цепочке и затухают со временем, поскольку используется цепочка с диссипацией. Для задания внешних локализованных возбуждений использовались ненулевые значения смещений частиц и/или их скоростей в начальный момент времени.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Исследование поляронного переноса заряда в однородной незамкнутой G/C цепочке ДНК выполнялось в рамках квантово-классической модели Пейрарда–Бишопа–Холстейна [29]–[34]. Динамика квантовой частицы в классической цепочке описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений, которая в безразмерных переменных имеет вид [24]:

$$\dot{c}_n = i\tau_e(c_{n-1} + c_{n+1}) - i\chi_{el}q_n c_n \quad (1)$$

$$\ddot{q}_n + \Gamma \dot{q}_n = e^{-q_n}(e^{-q_n} - 1) + \omega_{bond}^2(q_{n-1} - 2q_n + q_{n+1}) - \chi_h |c_n|^2, \quad (2)$$

где c_n – амплитуды вероятности локализации заряда на n -ом сайте ($\sum_n |c_n|^2 = 1$);

τ_e – отношение характерных времён эволюции волновой функции электрона и динамики возмущений в решётке;

χ_{el} и χ_h – безразмерные параметры связи электрона и решётки;

q_n – нормированное смещение, $\dot{q}_n = dq_n/d\tilde{t}$;

ω_{bond} – нормированная частота колебаний сайтов в решётке;

$\tilde{t} = \omega_M t$ – безразмерное время;

ω_M – частота линейных колебаний в изолированном сайте;

Γ – коэффициент трения, $\Gamma = \omega'/\omega_M$, $\omega' = \gamma/M = 6 \cdot 10^{11} \text{сек}^{-1}$ (см. [35]), для ДНК $\Gamma = 0.084$, см. [24].

Введём обозначение: $v_n(\tilde{t}) = \dot{q}_n(\tilde{t})$.

Система (1) – это дискретные уравнения Шрёдингера для электрона, а (2) – уравнения движения нуклеотидных пар. Система нелинейных дифференциальных уравнений (1), (2) решается методами типа Рунге–Кутты 4-го порядка и явного 4-х шагового метода Адамса–Бэшофота на этапе предсказания и расчетом поправки 3-х шаговым методом Адамса–Мултона. Расчёты выполнялись с использованием вычислительных средств кластеров ИМПБ РАН и МСЦ РАН. Цепочка рассматривается однородная и незамкнутая, то есть цепочка имеет два конца, что существенно для исследования движения поляронных состояний в цепочке в отсутствие электрического поля.

ПРИМЕРЫ ПОВЕДЕНИЯ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ САЙТОВ ПРИ ОТСУТСТВИИ ЗАРЯДА ЦЕПОЧКЕ

В этом разделе покажем, как ведут себя при отсутствии заряда в цепочке локализованные возбуждения, которые мы будем использовать для стимуляции движения полярона. Возмущение решётки за счёт смещений частиц из положений равновесия в начальный момент времени и использование ненулевых начальных значений скоростей частиц цепочки рассматривалось ранее в работах [3, 24]. Мы будем использовать, по-возможности, минимальные значения для скоростей сайтов и смещений сайтов цепочки в начальный момент времени. Другим словами можно сказать, что в начальный момент времени будем вводить в цепочку небольшую потенциальную или кинетическую энергию.

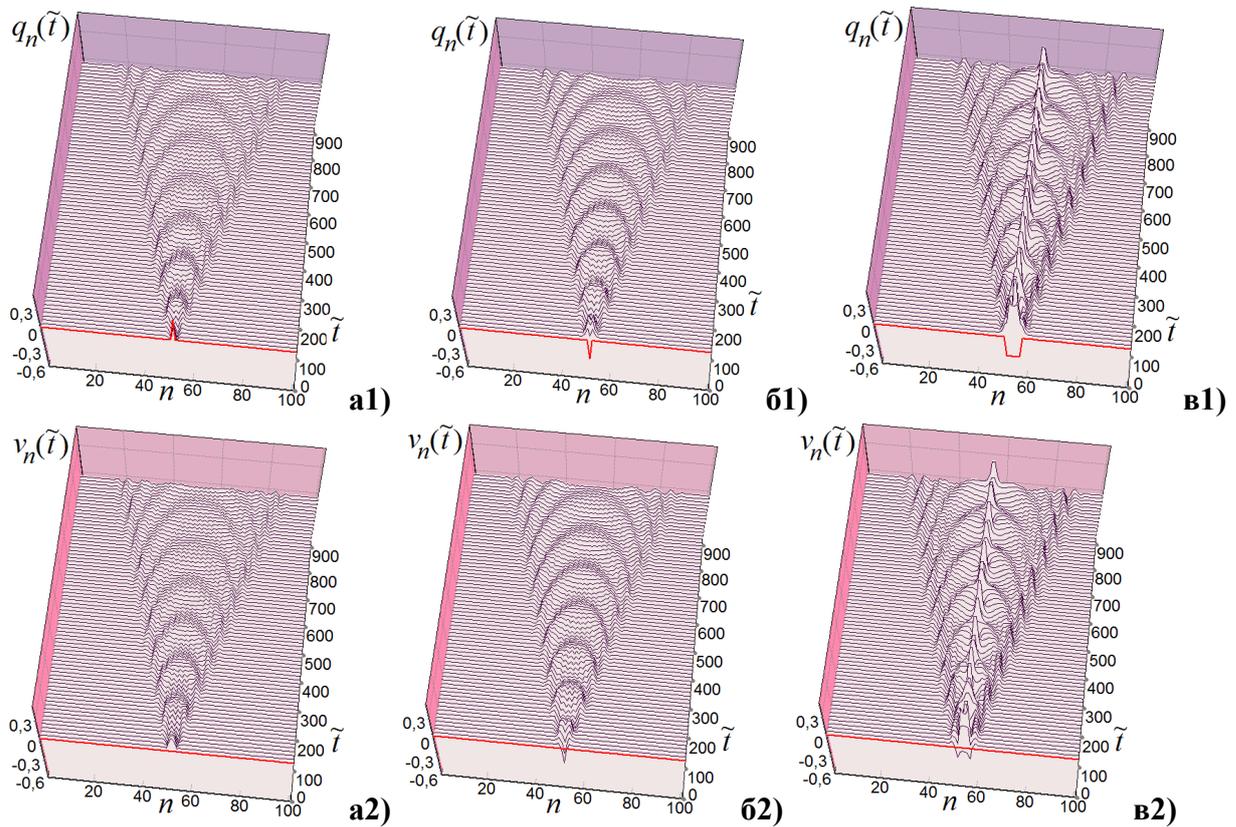


Рис. 1. Графики функций $q_n(\tilde{t})$ и соответствующие им графики функций $v_n(\tilde{t}) = \dot{q}_n(\tilde{t})$. Длина цепочки 101 сайт, центр цепочки – сайт с номером $n = 51$. Локализованное возбуждение в цепочке вызвано смещением сайтов из положений равновесия в начальный момент времени.

Уравнение движения при отсутствии заряда в цепочке следует из (2) при $\chi_h = 0$:

$$\ddot{q}_n + \Gamma \dot{q}_n = e^{-q_n}(e^{-q_n} - 1) + \omega_{bond}^2(q_{n-1} - 2q_n + q_{n+1}). \quad (3)$$

Для моделирования поведения локализованных возбуждений при отсутствии заряда в цепочке в уравнении (3), были взяты параметры $\omega_{bond} = 0.2$, $\Gamma = 0.001$.

Поскольку в уравнения движения (3) входит несимметричный член $e^{-q_n}(e^{-q_n} - 1)$ (потенциал Морзе), то реакция сайтов цепочки на внесённое внешнее воздействие (смещение сайтов, или ненулевая начальная скорость сайтов) зависит не только от величины этого воздействия, но и от его знака. Это хорошо видно из представленных ниже примеров.

Для того, чтобы не загромождать статью большим количеством графиков, но, тем не менее, предоставить наиболее полную информацию, большую часть графиков мы поместили в "Дополнительные материалы" к статье.

На рисунке 1 представлены примеры локализованных возбуждений при отсутствии заряда в цепочке. Эти возбуждения решётки формируются за счёт смещения сайтов из положений равновесия в начальный момент времени. Скорости сайтов в начальный момент времени нулевые. Мы выбираем небольшие значения для безразмерных величин начальных смещений сайтов. На рисунке 1,a1 $q_{52}(0) = 0.3$, на рисунке 1,b1 $q_{52}(0) = -0.3$, на рисунке 1,b1 начальное смещение сайтов выбрано в виде ступеньки: $q_{52}(0) = \dots = q_{57}(0) = -0.3$. Если при больших значениях начальных смещений сайтов или их скоростей в цепочке могут образовываться бризеры, бабблы, то при выбранных нами

значениях начальных смещений формируются небольшие возбуждения решётки, которые симметрично распределяются по цепочке и затухают со временем (при наличии трения). Для формирования возбуждений в цепочке мы выбрали сайты, находящиеся рядом с центром цепочки. Поскольку заряд отсутствует в цепочке, не имеет значения, в каком месте цепочки находилось начальное ненулевое смещение, распределение полученного возбуждения будет одинаковым, разумеется, до тех пор, пока возбуждение не начнёт отражаться от концов цепочки. Показаны примеры таких возбуждений, которые будут использоваться в дальнейшем исследовании для стимуляции движения полярона.

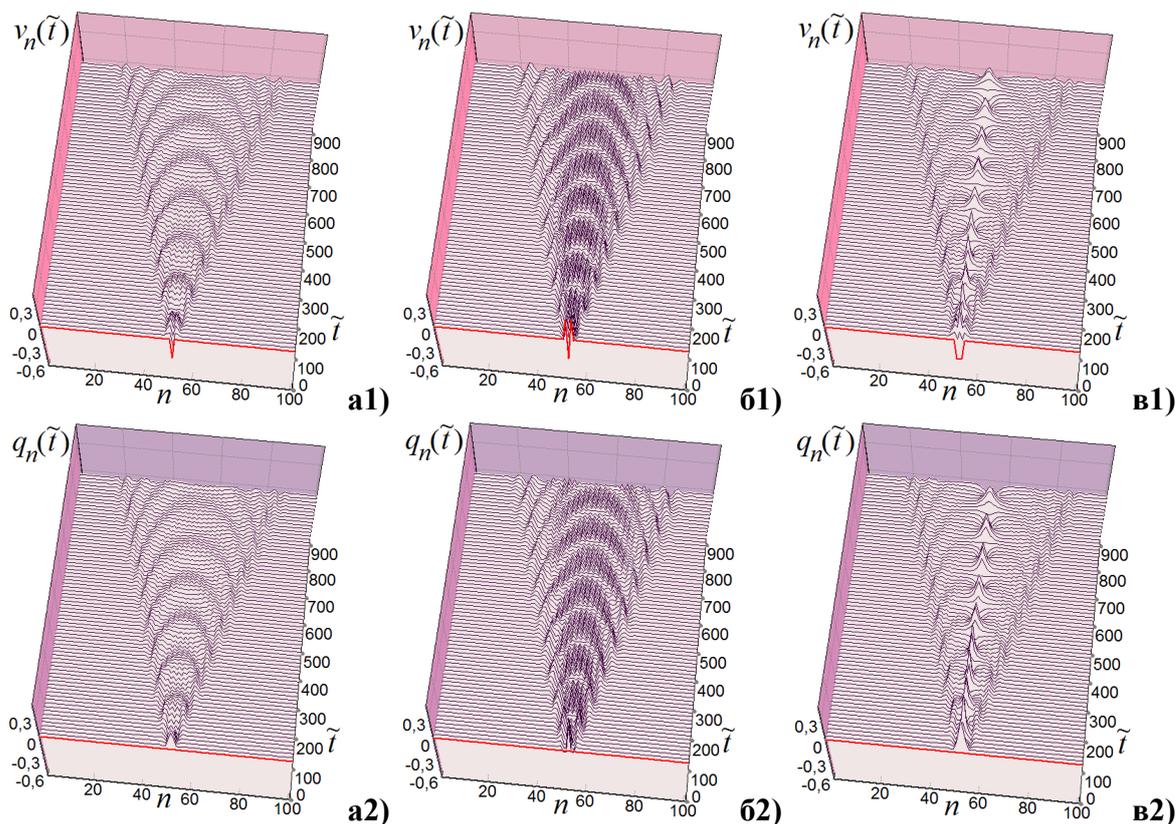


Рис. 2. Графики функций $v_n(\tilde{t}) = \dot{q}_n(\tilde{t})$ и соответствующие им графики функций $q_n(\tilde{t})$. Длина цепочки 101 сайт, центр цепочки – сайт с номером $n = 51$. Локализованное возбуждение в цепочке вызвано ненулевыми значениями скоростей сайтов в начальный момент времени.

На рисунке 2 возбуждения решётки формируются за счёт задания ненулевых начальных значений скоростей частиц цепочки. Смещения сайтов цепочки в начальный момент времени нулевые. Как и в предыдущем примере, мы выбираем небольшие значения безразмерных начальных скоростей частиц цепочки. На рисунке 2,а1 $v_{52}(0) = -0.3$, на рисунке 2,б1 $v_{52}(0) = 0.3, v_{53}(0) = -0.3, v_{54}(0) = 0.3$. На рисунке 2,в1, так же как и на рисунке 2,б1, ненулевые начальные скорости имеют те же три сайта, только все с одним знаком: $v_{52}(0) = -0.3, v_{53}(0) = -0.3, v_{54}(0) = -0.3$. На рисунке 2 хорошо видна разница при распределении этих двух начальных возбуждений по цепочке со временем.

Большее количество примеров представлено в ”Дополнительных материалах” к этому разделу.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ПОЛЯРОНА ПРИ НАЛИЧИИ В ЦЕПОЧКЕ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

В работе [28] было подробно исследовано поведение в цепочке устоявшегося и близкого к устоявшемуся поляронов, было показано, что их поведение, точнее взаимодействие с концом цепочки, отличаются незначительно. Поэтому в данной работе для моделирования поведения полярона в конечной цепочке мы помещали в начальный момент времени в цепочку полярон близкий к устоявшемуся. То есть такой полярон, который со временем практически не меняет своей формы и не сдвигается из своего начального положения, если в цепочке нет никаких возбуждений. Центр этого полярона помещается на сайт цепочки с номером n_0 . Поскольку в цепочке есть трение, то n_0 может не совпадать с центром цепочки, важно чтобы при заданном трении полярон не сдвигался из своего начального положения. При больших значениях коэффициента трения $\Gamma > 0.1$ полярон, близкий к устоявшемуся, помещённый не в центр цепочки, может оставаться в начальном положении, но при меньших значениях коэффициента трения. Например, при $\Gamma = 0.001$, полярон будет взаимодействовать с концом цепочки и начнёт двигаться (см. [28]), такое трение не может удержать полярон на месте. Поэтому в данной работе при исследовании взаимодействия полярона и локализованных возбуждений цепочки мы будем в начальный момент времени помещать полярон в центр цепочки. Таким образом, у нас никогда не возникнут сомнения по поводу причин движения полярона: при отсутствии внешних возбуждений в цепочке, полярон никогда из центра не сдвинется (а если сдвинется – значит погрешность вычислений превысила допустимое значение, то есть вычисления ошибочны).

Начальные значения выбираются в виде обратного гиперболического косинуса:

$$|c_n(0)| = \frac{\sqrt{2}}{4} \sqrt{\frac{\chi_{el} \cdot \chi_h}{\tau_e \xi}} \operatorname{ch}^{-1} \left(\frac{(\chi_{el} \cdot \chi_h)(n - n_0)}{4\tau_e \xi} \right), \quad (4)$$

$$q_n(0) = -|c_n(0)|^2 \cdot \chi_h / \xi, \quad \dot{q}_n(0) = 0,$$

где ξ – коэффициент растяжения, с помощью которого мы можем подобрать начальный полярон вида (4) максимально близким к устоявшемуся.

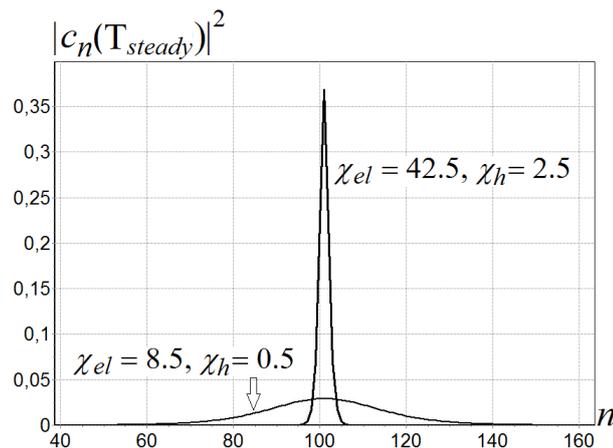


Рис. 3. Графики функции $|c_n|^2$ устоявшиеся в центре цепочки длиной $N = 201$ сайт для различных значений параметров χ_{el} и χ_h .

Как и в работе [28], рассмотрим взаимодействие полярона и локализованных возбуждений цепочки на примерах для двух поляронов с различным характерным размером: очень широкий полярон, для которого $\lim_{\bar{t} \rightarrow \infty} d(\bar{t}) \approx 52$, и более узкий полярон

с характерным размером $d(\infty) \approx 4.0$, $d(\tilde{t})$ – характерный размер полярона:

$$d(\tilde{t}) = \sum |c_n(\tilde{t})|^2 / \sum |c_n(\tilde{t})|^4 = 1 / \sum |c_n(\tilde{t})|^4. \quad (5)$$

Полинуклеотидной цепочке *polyG/polyC* соответствуют следующие значения параметров: $\tau_e = 18$, $\chi_{el} = 8.5$, $\chi_h = 0.5$, $\omega_{bond} = 0.2$, $\Gamma = 0.084$. Значения размерных и безразмерных параметров взяты из работы [24]. Таким значениям параметров соответствуют относительные смещения нуклеотидов от их равновесного положения $r \approx 3.1 \cdot 10^{-9}q$ (см) = $0.31q$ (Å) и скоростей $V = 2.26 \cdot 10^4v$ (см/сек), $t = 1.4 \cdot 10^{-13}\tilde{t}$ (сек). При таких параметрах цепочки в ПБХ модели полярон располагается на достаточно большом количестве сайтов: $d(\infty) \approx 52$ (см. рис. 3 для $\chi_{el} = 8.5$). Для указанных параметров цепочки значение коэффициента $\xi = 1$. Полярону с характерным размером $d(\infty) \approx 4.0$ соответствует цепочка со следующими значениями параметров: $\tau_e = 18$, $\chi_{el} = 42.5$, $\chi_h = 2.5$, $\omega_{bond} = 0.2$ (см. рис. 3 для $\chi_{el} = 42.5$). Для таких параметров цепочки значение коэффициента $\xi = 2$.

1. О поляроне и его взаимодействии с локализованными возбуждениями локализованными по центру полярона

В данной работе для стимуляции движения полярона по цепочке мы используем ненулевые значения смещений частиц и/или их скоростей в начальный момент времени. Если с использованием ненулевых начальных скоростей никаких особенностей не возникает, то использование ненулевых начальных смещений сайтов цепочки при наличии полярона в цепочке требует ясного понимания, что представляет собой полярон в полинуклеотидной цепочке. Напомним кратко некоторые определения полярона. Например: движение электрона, сопровождаемое перемещением создаваемой им деформации цепочки, называется поляроном. Или: полярон – квазичастица, состоящая из электрона и сопровождающего его деформации решётки. То есть, изменяя смещения сайтов в начальный момент времени, важно учитывать положение полярона в цепочке и с осторожностью изменять смещения тех сайтов, на которых находится полярон.

На рисунке 4 показано, как выглядит почти устоявшийся полярон в цепочке со следующими значениями параметров: $\tau_e = 18$, $\chi_{el} = 42.5$, $\chi_h = 2.5$, $\Gamma = 0.001$. Характерный размер устоявшегося полярона для такой цепочки $d(\infty) \approx 4.0$. Начальные значения взяты в виде обратного гиперболического косинуса вида (4) с коэффициентом растяжения $\xi = 2$.

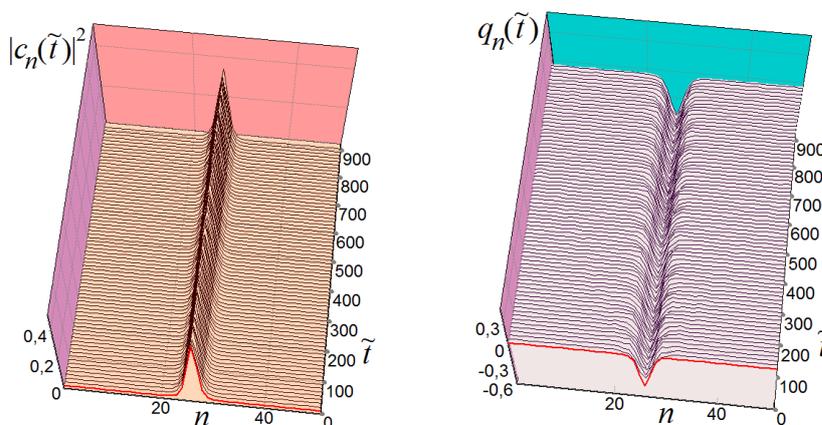


Рис. 4. Графики функций $|c_n(\tilde{t})|^2$ и $q_n(\tilde{t})$ для почти устоявшегося полярона в центре цепочки длиной $N = 51$ сайт для цепочки с параметрами $\chi_{el} = 42.5$ и $\chi_h = 2.5$.

Покажем, как ведёт себя полярон, если оказывать внешнее воздействие на сайт, на

котором находится центр полярона. На рисунке 5 показан тот же полярон, в цепочке с теми же параметрами, как и на рисунке 4, только длина цепочки $N = 101$. Центр полярона находится в центре цепочки на сайте с номером $n = 51$.

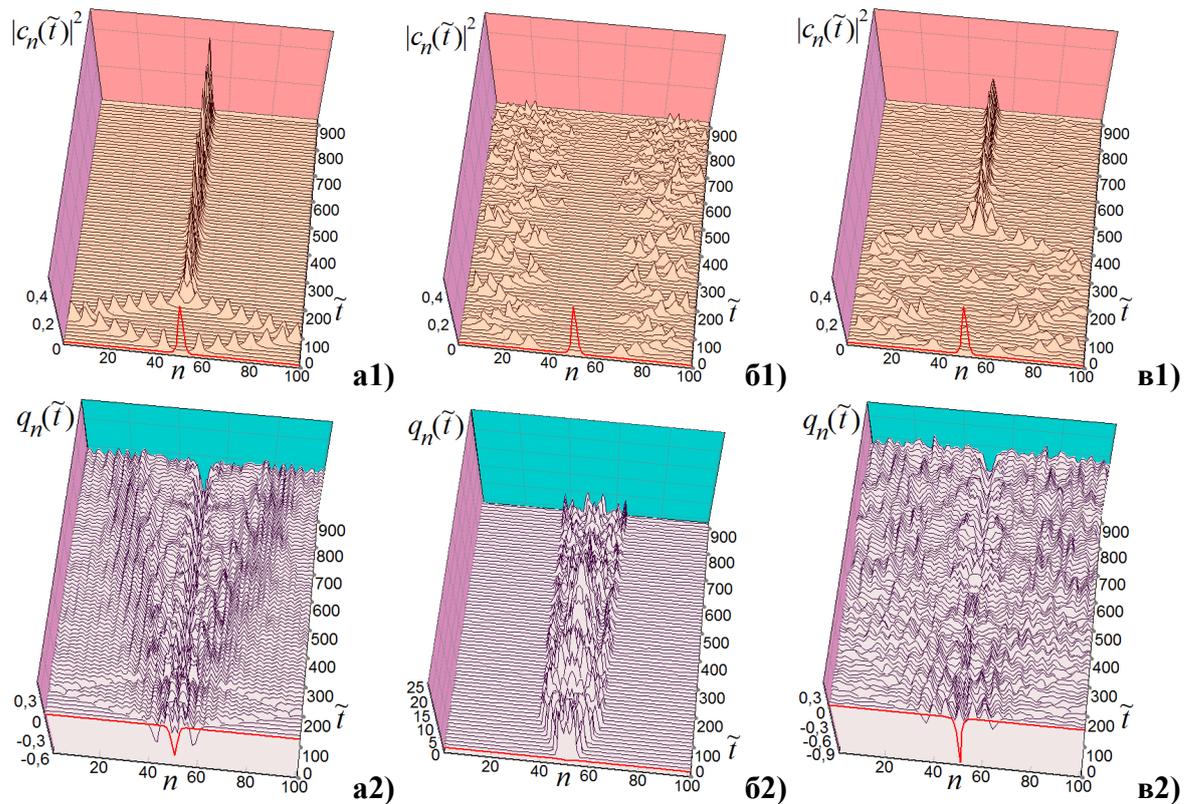


Рис. 5. Графики функций $|c_n(\tilde{t})|^2$ и соответствующие им графики функций $q_n(\tilde{t})$ при различных вариантах локализованных возбуждений в начальный момент времени. Полярон находится в центре цепочки, деформация решётки выполняется на сайте, соответствующем центру полярона. Длина цепочки 101 сайт, центр цепочки сайт с номером $n = 51$.

На рисунке 5,a1 в начальный момент времени скорость центрального сайта $v_{51}(0) = 1.0$. Красным цветом на рисунках 5,a1 и 5,a2 показан собственно почти устоявшийся полярон в цепочке в начальный момент времени, смещения сайтов, на которых находится полярон, ненулевые. И, в отличие от примеров возбуждений сайтов при отсутствии полярона в цепочке, когда мы вносили возмущение начальных скоростей частиц в недеформированную решётку, в данном случае, как и во многих последующих, мы оказываем воздействие не только на саму решётку, а в большей степени на полярон. На графиках хорошо видно, что такое воздействие разбивает полярон, и функция вероятностей и смещения цепочки, обусловленные наличием полярона, сразу разделяются на две части (см. рис. 5,a1 и 5,a2). Но через короткое время полярон восстанавливает первоначальную форму и в дальнейшем, через довольно большое время, полярон приблизится к устоявшемуся. Большое время для того, чтобы полярон принял форму устоявшегося и $\sum_n \dot{q}_n^2(\tilde{t}) \approx 0$, требуется для маленьких значений коэффициента трения, например такого, как в данном примере: $\Gamma = 0.001$. При больших значениях коэффициента трения для этого нужно значительно меньше времени. Кроме того, при больших значениях коэффициента трения, например при $\Gamma = 0.01$, такое воздействие на полярон как $v_{51}(0) = 1.0$, полярон не разобьёт, при таком трении полярон останется на месте и, немного поколебавшись на месте, довольно быстро примет форму устоявшегося.

На рисунках 5,b1 и 5,b2 скорость центрального сайта в начальный момент времени задана очень большой: $v_{51}(0) = 8.0$. При таком большом начальном импульсе образуется

баббл (см. рис. 5,б2). Такой баббл формирует очень большие смещения сайтов, это видно из значений левой шкалы графика 5,б2. За короткое время $\tilde{t} \approx 200$ баббл распространяется на вполне определённую ширину по сайтам, которая зависит от значения начального импульса. Колебания на всей ширине баббла ослабевают в течении очень большого времени, после чего колебания сайтов становятся равномерными по всей цепочке. Функция вероятностей, показанная на рисунке 5,б1, разваливается пополам, заряд долгое время остаётся разделённым на две части, причём в начальный период времени половинки заряда симметрично колеблются хорошо сохраняя свою форму. Постепенно функция вероятностей $|c_n(\tilde{t})|^2$ приближается к функции равномерного распределения по цепочке. При трении $\Gamma = 0.001$ равномерное распределение заряда сохраняется при безразмерном времени $\tilde{t} \approx 10^7$, затем, за ещё большее время заряд начнёт принимать форму устоявшегося полярона.

На рисунках 5,в1 и 5,в2 воздействие на полярон оказывается не с помощью начальной ненулевой скорости сайта, а с помощью изменения значения смещения сайта, на котором находится центр полярона. Значение безразмерного смещения сайта, на котором находится центр полярона, $q_{51}(0) \approx -0.45$. Изменим значение смещения центрального сайта на $q_{51}(0) = -1.0$. В этом случае полярон тоже сначала разваливается, но, со временем, восстанавливает свою форму.

В ”Дополнительных материалах” к этому разделу показаны примеры зависимости поведения полярона в цепочке от величины и характера воздействий на центр полярона.

2. Зависимость движения полярона от параметров локализованных возбуждений и от взаимного расположения в цепочке полярона и локализованных возбуждений

Выше мы рассмотрели полярон в цепочке без возбуждений и локализованные возбуждения при отсутствии заряда в цепочке. Покажем теперь, как полярон реагирует на появление в цепочке возбуждений расположенных не по центру полярона.

Рассмотрим взаимодействие локализованных возбуждений и полярона с характерным размером $d(\infty) \approx 4.0$ в цепочке с маленьким трением $\Gamma = 0.001$.

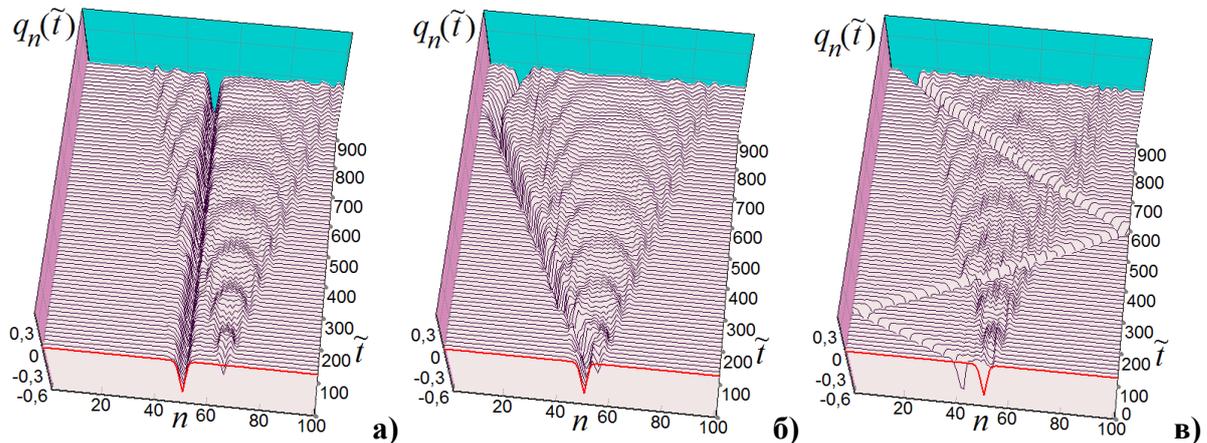


Рис. 6. Графики функций $q_n(\tilde{t})$ при различном положении в цепочке одного и того же локализованного возбуждения. Начальный полярон находится в центре цепочки на сайте с номером $n = 51$, длина цепочки 101 сайт. В начальный момент времени задана ненулевой скоростью одного сайта: а) – $v_{66}(0) = 0.3$; б) – $v_{56}(0) = 0.3$; в) – $v_{53}(0) = 0.3$.

На рисунке 6 показаны графики функций $q_n(\tilde{t})$, так как они наглядно показывают картину смещений сайтов в цепочке: хорошо видно не только движение смещений сайтов, формируемых поляроном, но и растекание по цепочке начального возбуждения. Проведённые вычисления показывают, что чем дальше от центра полярона находится

локализованное возбуждение, тем меньшее воздействие оно оказывает на скорость движения полярона.

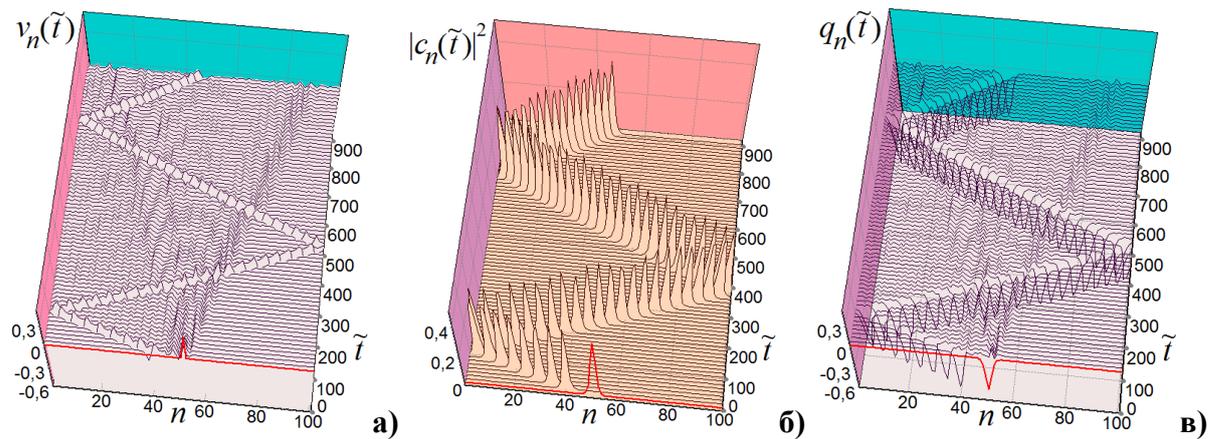


Рис. 7. Графики функций $v_n(\tilde{t})$, $c_n(\tilde{t})$, $q_n(\tilde{t})$. Начальный полярон находится в центре цепочки на сайте с номером $n = 51$, длина цепочки 101 сайт. В начальный момент времени задана ненулевой скоростью соседнего с центром цепочки сайта $v_{52}(0) = 0.3$.

На рисунке 7 показаны графики трёх функций в процессе одного и того же вычислительного эксперимента: локализованное возбуждение в цепочке вызвано ненулевой начальной скоростью сайта, соседнего с центром цепочки. Красная линия на рисунке 7,а показывает скорости сайтов цепочки в начальный момент времени, ненулевая скорость только у сайта с номером $n = 52$. Скорость $v_{52}(0) = 0.3$ такая же, как и в примерах на рисунке 6. Красная линия на рисунках 7,б и 7,в показывает почти устоявшийся полярон вида (4) в цепочке в начальный момент времени. Графики на рисунке 7 показывают, что полярон движется по цепочке, хорошо сохраняя свою первоначальную форму. Сравнивая графики на рисунке 6 и график на рисунке 7,в, мы видим, что распределение по цепочке начального возбуждения выражено лучше, если начальное возбуждение цепочки находится дальше от центра полярона.

В двух показанных выше примерах начальное возбуждение находится справа от центра цепочки, в этих примерах мы использовали положительную начальную скорость сайта для стимуляции возбуждения. Полярон движется влево, то есть в сторону от возбуждения. Но полярон не всегда движется от возбуждения, направление движения полярона зависит от многих параметров. В следующем примере мы выбрали отрицательное значение скорости сайта для стимуляции возбуждения.

В примере, представленном на рисунке 8, ненулевой отрицательной задана начальная скорость сайта с номером $n = 56$: $v_{56}(0) = -0.3$. В этом случае полярон движется влево от центра цепочки, так же как и в примерах на рисунках 6 и 7. Но на рисунках 8,б и 8,в полярон движется в сторону к возбуждаемому сайту. Вычислительные эксперименты, представленные на рисунках 7,в и 8,в, отличаются только знаком начальной скорости одного и того же сайта (соседнего с центром полярона): на рисунке 7,в $v_{52}(0) = 0.3$, на рисунке 8,в $v_{52}(0) = -0.3$. В этих двух случаях поляроны двигаются в разные стороны.

Мы рассмотрели, как полярон взаимодействует с локализованным возбуждением цепочки, вызванном ненулевой начальной скоростью одного сайта цепочки. Для стимуляции движения полярона можно задавать начальную скорость нескольких сайтов, использовать различные комбинации из начальных скоростей и смещений. Покажем, как можно использовать начальные смещения сайтов для стимуляции движения полярона.

Напомним, что находящийся в цепочке полярон вызывает деформацию решётки (см. рис. 4). На рисунке 9 показаны примеры различных (дополнительных к поляронной)

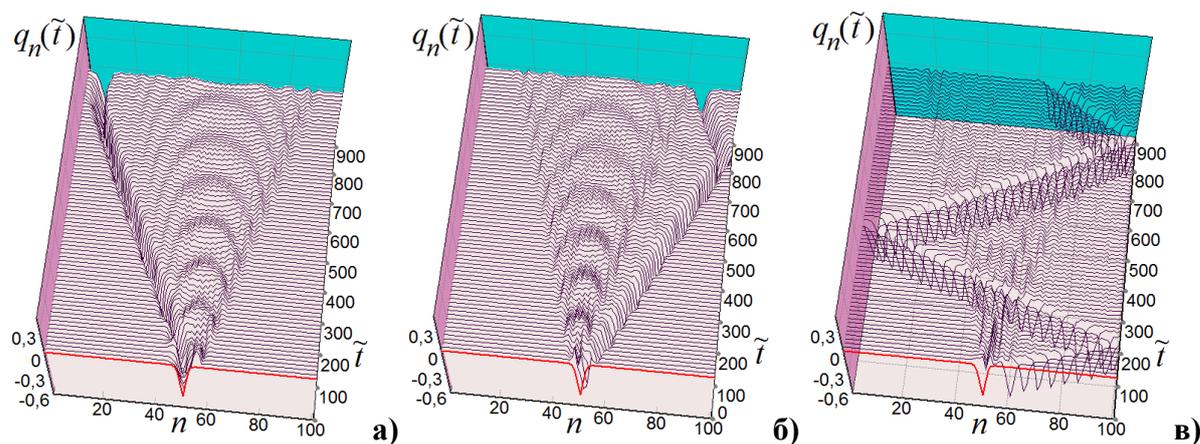


Рис. 8. Графики функций $q_n(\tilde{t})$ при различном положении в цепочке одного и того же локализованного возбуждения. Начальный полярон находится в центре цепочки на сайте с номером $n = 51$, длина цепочки 101 сайт. В начальный момент времени задана ненулевой скоростью одного сайта: а) $-v_{56}(0) = -0.3$; б) $-v_{54}(0) = -0.3$; в) $-v_{52}(0) = -0.3$.

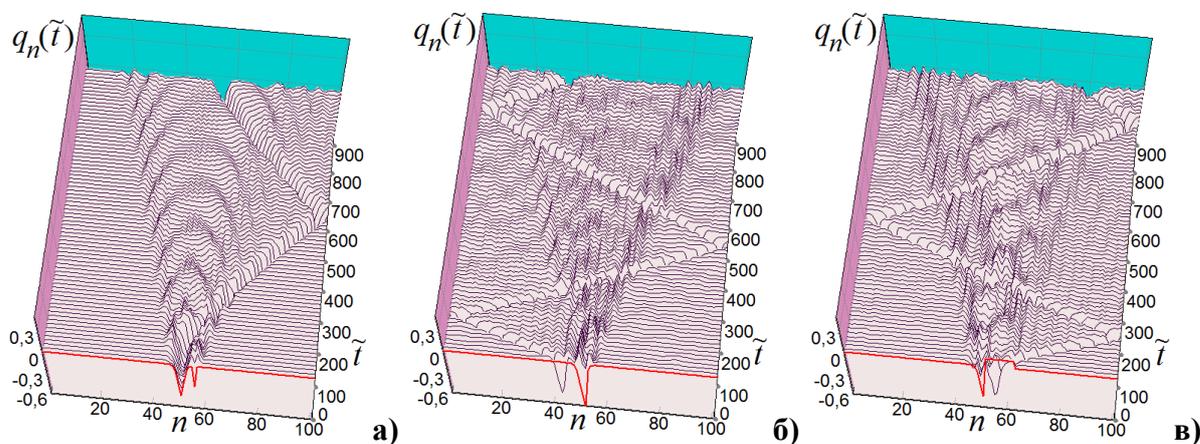


Рис. 9. Графики функций $q_n(\tilde{t})$ при различных локализованных возбуждениях. Начальный полярон находится в центре цепочки на сайте с номером $n = 51$, длина цепочки 101 сайт. В начальный момент времени в цепочку вносится деформация в дополнение к той, которую создаёт полярон.

деформаций решётки, при которых полярон движется и хорошо сохраняет свою форму. На рисунке 9,а красная линия показывает полярон в центре цепочки и смещение одного сайта с номером $n = 56$: $q_{56}(0) = -0.3$ в начальный момент времени. Мы сместили сайт, который находится рядом с поляроном и почти не изменяет деформацию тех сайтов решётки на которых находится центральная часть полярона в цепочке. Но этого оказывается достаточно, чтобы полярон пришёл в движение, причём полярон в этом случае движется вправо, в сторону смещённого сайта. В примере, показанном на рисунке 9,б мы изменили значение смещения сайта соседнего с центром полярона: $q_{52}(0) = q_{51}(0) - 0.2$. То есть мы прямо исказили деформацию тех сайтов цепочки, которые соответствуют собственно полярону. После такого незначительного вмешательства в форму самого полярона, полярон хорошо сохранил свою форму и сразу начал довольно быстро двигаться влево по цепочке, в другую сторону от смещённого сайта. В примере на рисунке 9,в мы изменили значения смещений части сайтов, на которых находился полярон, а именно: $q_{52}(0) = \dots = q_{62}(0) = 0.1$. То есть мы изменили смещения одиннадцати сайтов, находящихся рядом с центром полярона с правой стороны. В этом

случае полярон пришёл в движение в правую сторону, в сторону смещённых сайтов, хорошо сохраняя свою форму.

Как в случае использования скоростей сайтов для стимуляции движения полярона, так и при использовании смещений сайтов в начальный момент времени, скорость движения полярона зависит от взаимного расположения в цепочке полярона и начального возбуждения. Для примерно одинаковых по энергии возбуждений, скорость полярона больше, если возбуждение находится ближе к центру полярона, лучше всего на соседнем с центром полярона сайте. Но это верно, только если полярон устоявшийся или близкий к устоявшемуся. Полярон уже или шире устоявшегося приходит в движение от весьма далеко расположенного начального возбуждения, такого, на которое полярон, близкий к устоявшемуся, никак не будет реагировать.

Рассмотрим примеры движения полярона в длинной цепочке. На рисунках 10,а и 11,а представлены графики функции $N_{pik}(\tilde{t})$, показывающие положение пика полярона, или номер сайта, на котором находится максимум функции $|c_n(\tilde{t})|^2$. Для длинных цепочек графики этих функций немного отличаются см. [28]. Для коротких цепочек графики этих функций близки к графикам $X(\tilde{t})$, описывающей поведение центра масс частицы: $X(\tilde{t}) = \sum_n |c_n(\tilde{t})|^2 n$. Это верно, если в цепочке находится сохраняющий форму полярон, то есть функция вероятностей распределения заряда имеет один максимум.

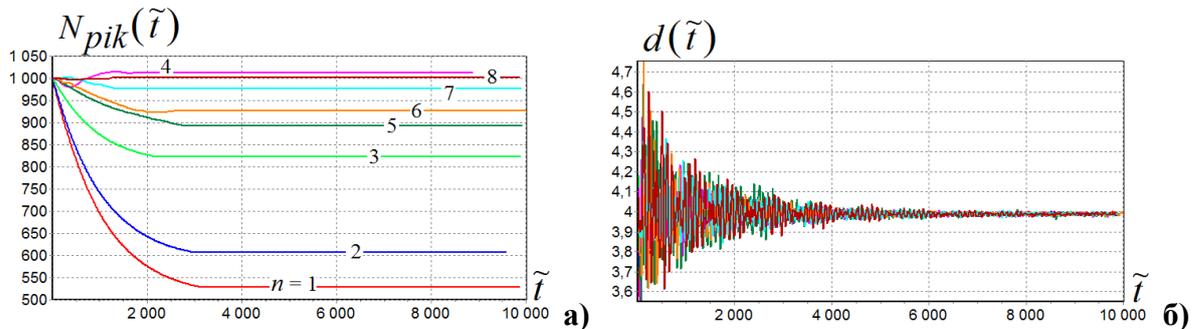


Рис. 10. а) – графики функции $N_{pik}(\tilde{t})$, показывающие положение пика полярона. б) – графики функции $d(\tilde{t})$, показывающие характерный размер полярона (5). Начальный полярон находится в центре цепочки на сайте с номером $n = 1001$, длина цепочки 2001 сайт. В начальный момент времени задана ненулевой скоростью одного из сайтов с номером $n_0 = 1001 + n, n = 1, 2, \dots, 8, v_{n_0}(0) = 0.3$.

В представленном выше примере для стимуляции движения полярона использовались ненулевые значения скоростей сайтов, расположенных последовательно с одной стороны от центра полярона, начиная с сайта, соседнего с центром полярона, в сторону увеличения номеров сайтов. Значение начальной скорости одинаковое для каждого выбранного сайта: $v_{n_0}(0) = 0.3, n_0 = 1001 + n, n = 1, 2, \dots, 8$. Так как в цепочке присутствует маленькое трение $\Gamma = 0.001$, то полярон со временем останавливается. Как и в примерах для короткой цепочки, движение полярона в длинной цепочке (2001 сайт) зависит от взаимного положения полярона и возбуждаемого сайта. На рисунке 10,а цифрами отмечены номера сайтов с ненулевыми начальными значениями по порядку, начиная с сайта соседнего с центром полярона. Число $n = 1$ указывает на сайт с номером $n = 1002$. Графики функции $N_{pik}(\tilde{t})$ на рисунке 10,а показывают, что возмущение скоростей трёх ближайших к центру полярона сайтов, приводит к движению полярона в противоположную возбуждению сторону. В этих трёх случаях скорость полярона выше если возбуждаемый сайт ближе к центру полярона. При удалении возбуждения от центра полярона, скорость полярона становится меньше и направление его движения становится неоднозначным (или произвольным). График функции $N_{pik}(\tilde{t})$, отмеченный

цифрой 4, показывает, что полярон сначала двигался в сторону от возбуждаемого сайта, затем направление движения поменялось на противоположное ещё два раза до остановки полярона. График с номером 7 показывает, что полярон сначала немного сдвинулся в сторону к возбуждению, затем сдвинулся примерно на 25 сайтов в противоположную сторону.

Графики на рисунке 10,б показывают характерный размер полярона – функцию $d(\tilde{t})$ вида (5). В начальный момент времени использовался полярон вида (4), близкий к устоявшемуся, его характерный размер $d(0) \approx 4.0$. Представленные графики функций $d(\tilde{t})$ показывают, что во всех случаях данного примера полярон в начале движения колеблется, его форма заметно меняется в процессе движения. Но со временем эти колебания затухают и полярон принимает форму устоявшегося с характерным размером $d(\infty) \approx 4.0$.

Аналогичные вычисления были проведены и для более удалённых от центра полярона возбуждаемых сайтов. Для десяти возбуждаемых сайтов следующих за сайтами, использованными в примерах на рисунке 10, для $n_0 = 1001 + n, n = 9, 10, \dots, 18$, поведение полярона аналогично показанному на графике с номером 8 на рисунке 10,а. В этих случаях полярон немного сдвигается в произвольную сторону и затем остаётся неподвижным. На более удалённые возбуждаемые сайты полярон не реагирует и остаётся неподвижным, естественно при выбранных параметрах цепочки и значения ненулевого возбуждения скорости сайта.

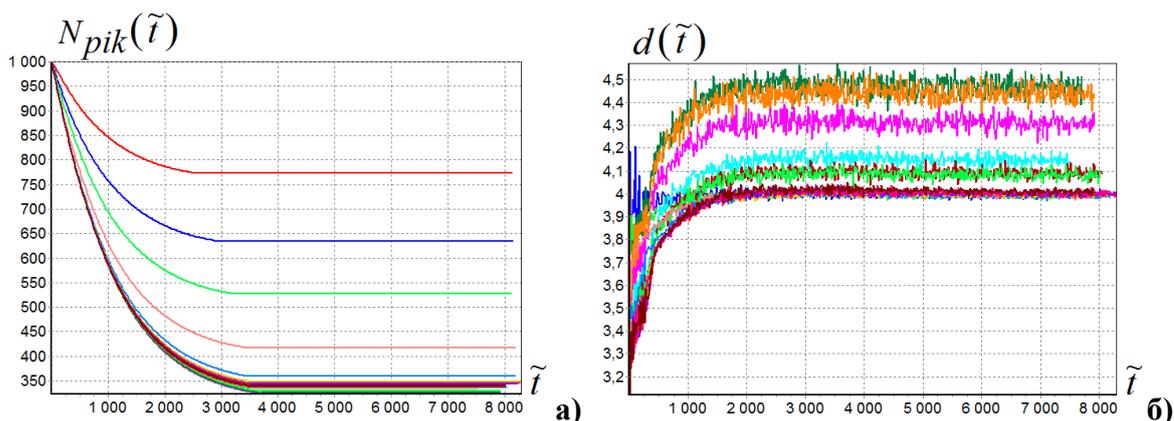


Рис. 11. Графики функций $N_{pik}(\tilde{t})$ и $d(\tilde{t})$. Начальный полярон находится в центре цепочки на сайте с номером $n = 1001$, длина цепочки 2001 сайт. В начальный момент времени задана ненулевой скоростью одного и того же сайта с номером $n_0 = 1002$, $v_{1002}(0) = 0.1 + 0.1 * n, n = 1, 2, \dots, 16$.

Во всех шестнадцати примерах на рисунке 11 для стимуляции движения полярона в начальный момент времени задавалась ненулевой скоростью сайта с номером $n_0 = 1002$, соседнего с центром полярона. В начальный момент времени центр полярона находился на сайте с номером $n = 1001$, в центре цепочки длиной 2001 сайт. Изменялось только значение начальной скорости сайта: $v_{1002}(0) = 0.1 + 0.1 * n, n = 1, 2, \dots, 16$. На рисунке 11,а верхний график (красная линия) соответствует начальной скорости $v_{1002}(0) = 0.1$. Во всех случаях полярон движется в сторону от возбуждаемого сайта. С увеличением начальной скорости возбуждаемого сайта от $v_{1002}(0) = 0.1$ до $v_{1002}(0) = 0.5$ скорость полярона возрастает и полярон уходит на большее расстояние. Дальнейшее увеличение начальной скорости сайта не приводит к увеличению скорости полярона. Причина этого частично видна на рисунке 11,б, на котором показаны характерные размеры поляронов для различных значений начальных скоростей сайтов. Как в примерах на рисунке 10, так и в данном случае, использовался начальный полярон вида (4), близкий к устоявшемуся,

с характерным размером $d(0) \approx 4.0$. Для небольших значений начальной скорости сайта, до $v_{1002}(0) = 0.5$, полярон в начале движения колеблется, но эти колебания затухают, и полярон постепенно становится устоявшимся. Для всех значений начальной скорости сайта $v_{1002}(0)$ характерный размер полярона в самом начале движения всегда уменьшается, а затем увеличивается до размера устоявшегося полярона или больше. С увеличением начальной скорости возбуждаемого сайта, для $v_{1002}(0) > 0.5$, характерный размер полярона увеличивается через некоторое время после начала движения и затем длительное время сохраняет значение большее, чем для устоявшегося полярона: $d(\infty) \approx 4.0$. Кроме того, при больших значениях $v_{1002}(0) > 1.$, на сайте с номером $n_0 = 1002$ образуется односайтовый бризер с большой амплитудой, который сохраняется долгое время и создаёт, при взаимодействии с движущимся поляроном, излучение колеблющихся сайтов в сторону полярона. Так же по всей цепочке создаётся возбуждение всех сайтов, которые колеблются со значительно большей амплитудой по сравнению с возбуждением сайтов вследствие малого начального импульса. Всё это понижает энергию системы, которая затрачивается на движение полярона.

Существенно отличается характер движения полярона в короткой и длинной цепочках. Как было сказано выше, при большой начальной скорости возбуждаемого сайта, на месте этого сайта образуется достаточно мощный бризер. В длинной цепочке полярон может остановиться прежде, чем отразится от края цепочки и вернётся к центру, или бризер к этому моменту достаточно ослабнет, чтобы не влиять существенно на движение и форму полярона. В короткой цепочке полярон отразится от края и вернётся к бризеру быстро. В этом случае возникает множество различных вариантов взаимодействия полярона с сильным бризером. Полярон может отразиться от бризера и начать движение в обратную сторону почти не изменив своей формы. Полярон может несколько раз подобным образом отражаться от бризера и края цепочки, и затем полярон может пройти через ослабевший бризер к другому краю цепочки немного или сильно изменив форму и даже развалиться на две части. Полярон может развалиться и при первом возвращении к бризеру. Заметим, что при отражении от любого края цепочки полярон всегда очень хорошо сохраняет свою форму и практически не теряет скорость движения, это хорошо видно в рассмотренных выше примерах. Но при прохождении области начального возбуждения после отражения от края цепочки полярон всегда претерпевает воздействие на свою форму и скорость движения: при маленьком начальном импульсе влияние почти незаметное, при большом – полярон просто разваливается.

В работе [28] мы исследовали движение полярона помещённого в начальный момент времени не в центр цепочки при отсутствии внешних возбуждений. Нами было показано, что наименьшей подвижностью обладают поляроны устоявшийся и близкий к устоявшемуся, а поляроны более узкие или широкие могут двигаться быстрее. В работе [28] мы в начальный момент времени использовали поляроны более узкие или широкие, которые в процессе движения быстро стремились к форме устоявшегося полярона. В данной работе в начальный момент времени использовался начальный полярон близкий к устоявшемуся, который становился шире устоявшегося для $v_{1002}(0) > 0.5$. Графики движения полярона, представленные на рисунке 11, показывают, что полярон (или поляронное состояние) шире устоявшегося полярона, движется медленнее полярона, близкого к устоявшемуся. Здесь нет никакого противоречия, так как в работе [28] рассматривался полярон при отсутствии возбуждений в цепочке. В данной работе, в примерах на рисунке 11 для больших значений начального возбуждения, в цепочке кроме поляронного состояния, или полярона шире устоявшегося, присутствует долго незатухающий бризер, и все сайты цепочки колеблются со значительной амплитудой.

Покажем, как взаимодействует рассмотренный выше полярон характерного размера

$d(\infty) \approx 4.0$ с локализованными возбуждениями в цепочках с бóльшим трением. На рисунке 12 показаны графики движения полярона в цепочке с трением $\Gamma = 0.01$. Стимуляция движения полярона выполнена с использованием ненулевой начальной скорости одного из сайтов вблизи центра полярона. Как и во всех примерах, рассмотренных выше, начальный полярон взят близким к устоявшемуся виду (4) и помещён в центр цепочки. Величина начальной безразмерной скорости возбуждаемого сайта взята равной 0.6. В цепочке с маленьким значением трения $\Gamma = 0.001$ такая начальная скорость сайта вызовет образование достаточно большого и долго существующего бризера (см. описание к рис. 11). На рисунках 12,б и 12,в хорошо видно быстро затухающее возбуждение в центре цепочки. Такое возбуждение почти так же ведёт себя в цепочке без полярона. Несмотря на то, что образовавшееся локализованное возбуждение очень быстро затухает, оно вызывает движение полярона на достаточно большое для такого трения расстояние.

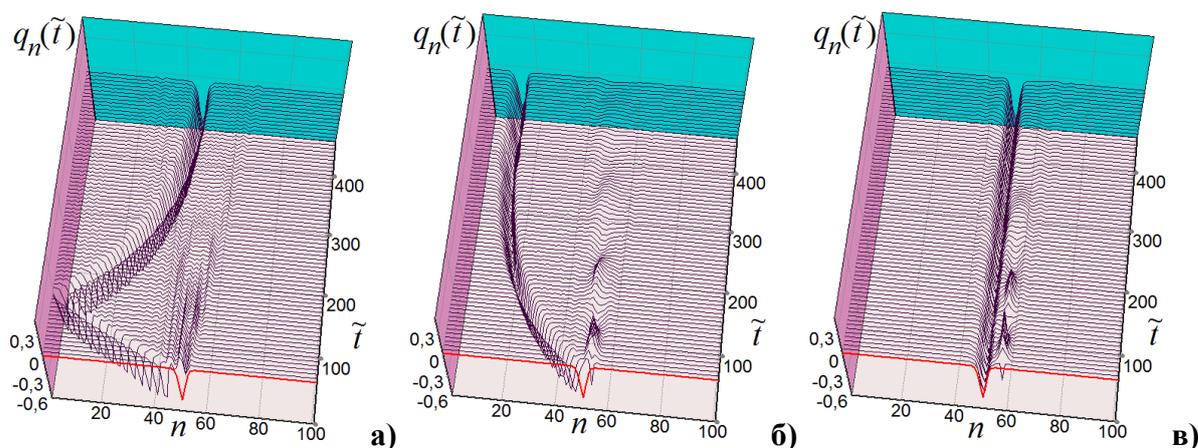


Рис. 12. Графики функций $q_n(\tilde{t})$ при различном положении в цепочке одинакового локализованного возбуждения. Начальный полярон находится в центре цепочки на сайте с номером $n = 51$, длина цепочки 101 сайт, коэффициент трения $\Gamma = 0.01$. В начальный момент времени скорость одного сайта задаётся ненулевой и равной $v_n(0) = 0.6$: а) – $v_{52}(0) = 0.6$; б) – $v_{54}(0) = 0.6$; в) – $v_{58}(0) = 0.6$.

Для того, чтобы сдвинуть полярон в цепочке с таким большим трением, как $\Gamma = 0.084$, требуется использовать более мощные локализованные возбуждения цепочки, по сравнению с теми, которые были достаточны для цепочек с маленьким трением. На рисунке 13 показаны два примера движения полярона в цепочке с трением $\Gamma = 0.084$. В обоих случаях локализованное возбуждение обусловлено ненулевой начальной скоростью соседнего с центром полярона сайта. В примере на рисунке 13,а скорость сайта с номером $n = 52$ равна 1.0, на рисунке 13,б – $v_{52}(0) = 2.0$. В первом случае полярон сдвигается на 14 сайтов, во втором – на 16 сайтов. Ранее было показано, что для цепочки с трением $\Gamma = 0.001$, такие возбуждения образуют долго живущие бризеры и нарушают форму полярона (см. рис. 5 и рис. 11). Представленные на рисунке 13 графики показывают, что полярон быстро смещается на своё максимальное расстояние и останавливается. На графиках хорошо видно как быстро затухает сформированное в начальный момент локализованное возбуждение. Дальнейшее увеличение начальной скорости сайта соседнего с центром полярона не приводит к увеличению скорости полярона и расстояния, на которое полярон может передвинуться. Например, возбуждение, вызванное начальной скоростью $v_{52}(0) = 10.0$, сдвигает полярон на 16 сайтов, как и для примера на рисунке 13,б для $v_{52}(0) = 2.0$.

В целом можно сказать, что поведение полярона в цепочке с большим трением ($\Gamma = 0.084$) аналогично поведению полярона в цепочках с меньшим трением. А

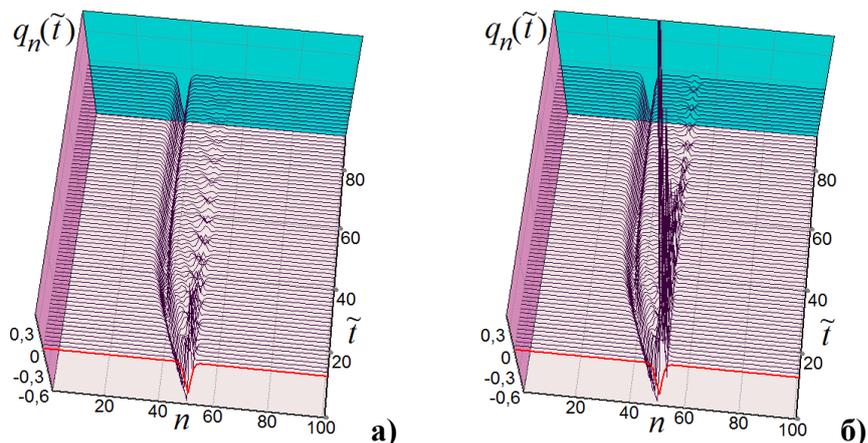


Рис. 13. Графики функций $q_n(\tilde{t})$. Начальный полярон находится в центре цепочки на сайте с номером $n = 51$, длина цепочки 101 сайт, коэффициент трения $\Gamma = 0.084$. В начальный момент задана ненулевой скоростью сайта с номером $n = 52$ – соседнего с центром цепочки: а) – $v_{52}(0) = 1.0$; б) – $v_{52}(0) = 2.0$.

именно: наибольшую скорость полярону придаёт возмущение сайта, соседнего с центром полярона, скорость полярона зависит от величины сформированного возмущения и от расстояния этого возмущения до центра полярона. При этом нужно помнить, что слишком большие возмущения могут разрушать полярон или нарушать его форму, что приводит к изменению характера поведения полярона. Величина предельно допустимых возбуждений различная для различных параметров цепочки и зависит более всего от значения коэффициента трения в цепочке и от расстояния возбуждения до центра полярона.

В ”Дополнительных материалах” к этому разделу показаны другие примеры зависимости поведения полярона в цепочке от локализованных возбуждений.

3. Движение широкого полярона в цепочке и необходимые для этого параметры локализованных возбуждений

Рассмотрим движение в цепочке очень широкого полярона с характерным размером $d(\infty) \approx 52.0$ (см. рис. 3 для $\chi_{el} = 8.5$). Такому полярону соответствует цепочка со следующими значениями параметров: $\tau_e = 18$, $\chi_{el} = 8.5$, $\chi_h = 0.5$, $\omega_{bond} = 0.2$. Форма полярона с характерным размером $d(\infty) \approx 4.0$ значительно отличается от формы широкого полярона с $d(\infty) \approx 52.0$, очевидно, что и взаимодействие таких разных поляронов с локализованными возбуждениями будут различными.

На рисунке 14 показаны примеры движения полярона в цепочке с трением $\Gamma = 0.001$. Длина цепочки 301 сайт, в начальный момент времени полярон находится в центре цепочки на сайте с номером $n = 151$. Локализованное возбуждение цепочки во всех примерах на рисунке 14 формируется заданием ненулевой начальной скорости одного или нескольких сайтов цепочки. На рисунке 14,а стимуляция движения полярона выполнена с использованием ненулевой начальной скорости одного сайта с номером $n = 152$, соседнего с центром полярона. Значение безразмерной начальной скорости взято небольшим, $v_{152}(0) = 0.05$. За безразмерное время показанное на графике полярон смещается на 24 сайта, форма полярона в процессе движения сохраняется хорошо.

В примере, показанном на рисунке 14,б в начальный момент задаётся ненулевой скоростью двадцати сайтов, начиная с сайта, соседнего с центром полярона: $v_n(0) = (-1)^n \cdot 0.05$, $n = 152, 153, \dots, 172$. В этом случае полярон движется со значительно бóльшей скоростью, форма полярона, несмотря на небольшие колебания, сохраняется

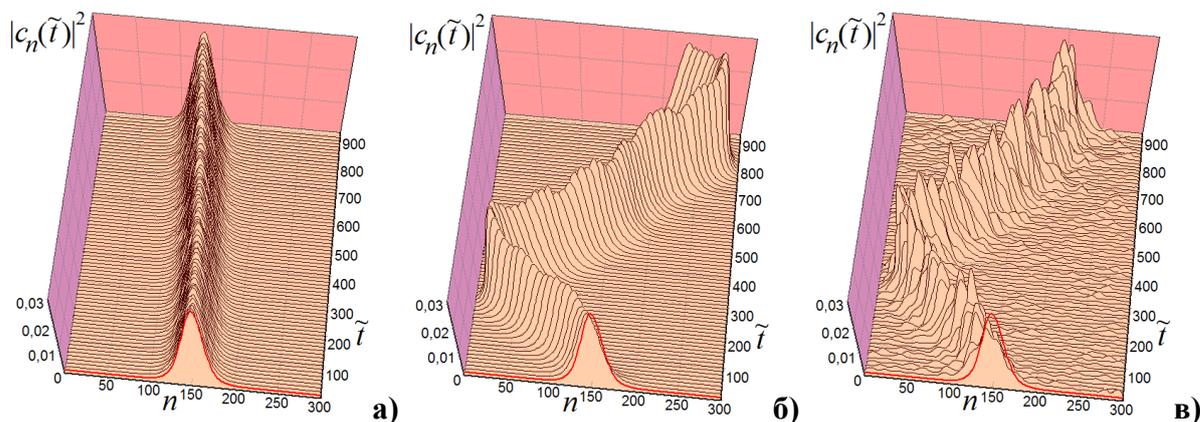


Рис. 14. Графики функций $|c_n(\tilde{t})|^2$ при различных локализованных возбуждениях. Начальный полярон находится в центре цепочки на сайте с номером $n = 151$, длина цепочки 301 сайт, коэффициент трения $\Gamma = 0.001$.

достаточно хорошо, колебания смещений сайтов цепочки значительно больше, чем для примера на рисунке 14,а. Если увеличивать количество сайтов, используемых для формирования начального возбуждения, то полярон после его отражения от левого конца цепочки будет отражаться от возбуждения в центре цепочки (для коротких цепочек), которое сохраняется довольно продолжительное время, поскольку в этом случае использовано маленькое трение $\Gamma = 0.001$. Скорость движения полярона при дальнейшем увеличении ширины начального возбуждения сайтов немного возрастает.

Для полярона очень большого радиуса с $d(\infty) \approx 52.0$, в отличие от более узких поляронов, характерной чертой является выраженная реакция на увеличение ширины распределения по сайтам используемого начального локализованного возбуждения (см. рис. 14,а и 14,б). Полярон радиуса $d(\infty) \approx 4.0$ реагирует главным образом на положение начального возбуждения: чем ближе возбуждение к центру полярона, тем быстрее движется полярон. Если стимулировать движение узкого полярона ненулевой начальной скоростью одного или двадцати сайтов по аналогии с примерами на рисунках 14,а и 14,б, то не будет наблюдаться существенной разницы в характере и скорости движения полярона.

Пример на рисунке 14,в отличается от примера на рисунке 14,б тем, что в начальный момент скорости сайтов имеют один знак, а не чередующиеся знаки. На рисунке 14,в задана ненулевой скоростью десяти сайтов: $v_n(0) = 0.05, n = 152, 153, \dots, 162$. На показанном графике хорошо видно, что форма полярона в процессе движения испытывает значительные колебания, при этом колебания смещений сайтов цепочки очень большие, сопоставимые со смещениями сайтов, которые формирует сам полярон. Но, несмотря на значительное возбуждение сайтов цепочки, полярон в этом случае движется, хотя и медленнее, чем для случая начального возбуждения в цепочке при тех же десяти сайтах, но с чередующимися знаками: $v_n(0) = (-1)^n \cdot 0.05, n = 152, 153, \dots, 162$.

В цепочках с большим трением для стимуляции движения полярона можно использовать большие значения начальных скоростей сайтов или более значительные смещения сайтов. В примерах на рисунке 15 использовалась цепочка с трением $\Gamma = 0.01$. Как и в предыдущих примерах на рисунке 14, в примерах на рисунке 15 длина цепочки 301 сайт, полярон находится в центре цепочки на сайте с номером $n = 151$ в начальный момент времени. Во всех трёх показанных примерах для формирования начального возбуждения в цепочке использовалась ненулевая начальная скорость одного сайта, соседнего с центром полярона: на рисунке а) $v_{152}(0) = 0.2$, на рисунке б) $v_{152}(0) = 0.3$, на рисунке в) $v_{152}(0) = 0.6$. Поскольку трение в цепочке достаточно большое $\Gamma = 0.01$,

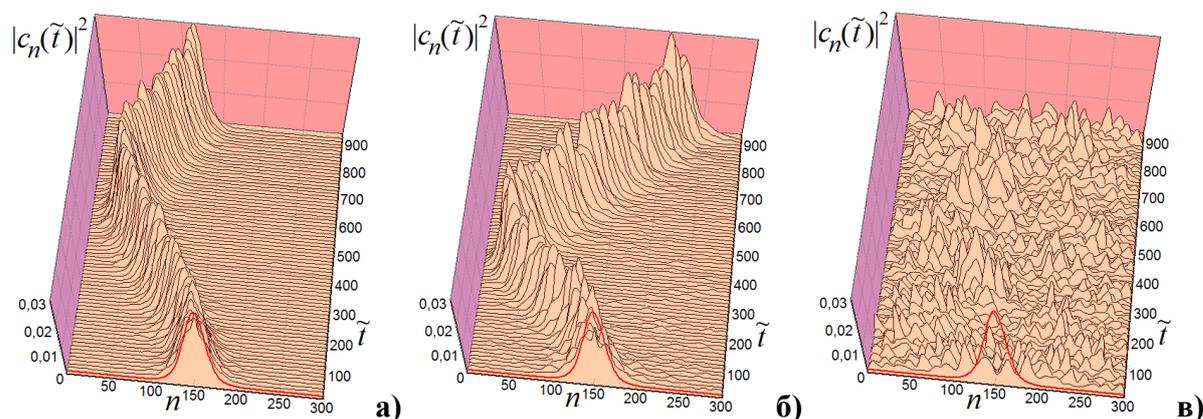


Рис. 15. Графики функций $|c_n(\tilde{t})|^2$ при локализованных возбуждениях вызванных заданием различной ненулевой начальной скорости соседнего с центром полярона сайта. Начальный полярон находится в центре цепочки на сайте с номером $n = 151$, длина цепочки 301 сайт, коэффициент трения $\Gamma = 0.01$. В начальный момент задана ненулевой скоростью одного сайта с номером $n = 152$ – соседнего с центром цепочки: а) – $v_{152}(0) = 0.2$; б) – $v_{152}(0) = 0.3$; в) – $v_{152}(0) = 0.6$.

начальное возбуждение в цепочке быстро затухает; оба этих фактора позволяют полярону не развалиться и при движении быстрее стремиться к форме устоявшегося полярона (в сравнении с цепочками с меньшим трением). Примеры, представленные на рисунках 15,а и 15,б, показывают, что с увеличением начальной скорости сайта с $v_{152}(0) = 0.2$ до $v_{152}(0) = 0.3$, скорость движения полярона возрастает и форма полярона в начале движения сохраняется хуже. При использовании очень большого значения скорости сайта $v_{152}(0) = 0.6$ для формирования начального возбуждения, полярон разваливается, см. рисунок 15,в.

В ”Дополнительных материалах” к этому разделу показаны другие примеры движения широкого полярона в цепочке.

ВЫВОДЫ

Ранее, в работе [28] нами были представлены результаты численных экспериментов, демонстрирующие возможность переноса заряда поляронами в однородной конечной незамкнутой G/C цепочке ДНК при отсутствии электрического поля и дополнительных возбуждений в цепочке. Было показано, что полярон, помещённый в начальный момент времени не в центр цепочки, приобретает способность двигаться. Было также показано, что скорость движения полярона по цепочке зависит от его начальной формы. В работе [28] мы ввели определения и рассмотрели поведение в цепочке нескольких видов поляронных состояний: полярон устоявшийся, близкий к устоявшемуся, уже и шире устоявшегося. В данной работе мы использовали в качестве начального полярона полярон близкий к устоявшемуся.

В начальный момент времени мы помещали полярон близкий к устоявшемуся в центр цепочки. При отсутствии поля и возбуждений в цепочке такой полярон не сдвинется из своего начального положения. Как и в работе [28], рассматривается цепочка в отсутствие электрического поля. Но в данной работе мы рассматривали поведение полярона при наличии в цепочке внешних локализованных возбуждений. При отсутствии заряда и при наличии трения в цепочке такие возбуждения в целом не перемещаются по цепочке, затухают со временем и распределяются по цепочке. Характер распределения по цепочке локализованного возбуждения зависит от начальной формы самого возбуждения, от

его расположения в цепочке. Например, если начальное возбуждение расположено несимметрично по отношению к концам цепочки, то отражаться от разных концов цепочки оно начнёт в разное время. И даже если такое начальное возбуждение было симметричным по отношению к своему центру, например возбуждение находилось на одном сайте, то после отражения от конца цепочки распрелившееся возбуждение будет несимметричным.

Несколько вариантов возбуждений представлены в разделе "Примеры поведения локализованных возбуждений сайтов при отсутствии заряда в цепочке" и в "Дополнительных материалах".

Для моделирования взаимодействия полярона с внешними локализованными возбуждениями сайтов мы использовали два различных варианта цепочек. Один вариант: цепочка с безразмерными параметрами связи электрона и решётки $\chi_{el} = 42.5$, $\chi_h = 2.5$. Устоявшийся полярон в такой цепочке имеет характерный размер $d(\infty) \approx 4.0$. Второй вариант: цепочка с безразмерными параметрами связи электрона и решётки $\chi_{el} = 8.5$, $\chi_h = 0.5$. В этом случае полярон располагается на достаточно большом количестве сайтов: $d(\infty) \approx 52$. Графики указанных поляронов представлены на рисунке 3.

В одних случаях для формирования локализованных возбуждений сайтов мы использовали ненулевые значения скоростей сайтов в начальный момент времени. В других – непосредственно смещения сайтов с учётом того, что находящийся в цепочке полярон вызывает деформацию решётки. Другими словами можно сказать, что для стимуляции движения полярона в цепочку вносилась деформация решётки в дополнение к той, которую формирует сам полярон.

Было показано, что симметричное локализованное возбуждение, расположенное по центру полярона, не вызывает движения полярона по цепочке, но, в зависимости от величины воздействия, может на некоторое время нарушить форму полярона или разбить его, при этом сохраняется симметрия распределения заряда в цепочке. Примеры представлены в разделе "О поляроне и его взаимодействии с локализованными возбуждениями локализованными по центру полярона" и в "Дополнительных материалах".

В данной работе было рассмотрено взаимодействие полярона близкого к устоявшемуся и заданного начального возбуждения в цепочке. Начальный полярон уже или шире устоявшегося, взаимодействует с возбуждением в цепочке несколько иначе.

Из проведённых вычислений следует, что характер и скорость движения полярона зависят от многих параметров:

- от взаимного расположения полярона и локализованного возбуждения в цепочке,
- от формы и параметров заданного начального локализованного возбуждения в цепочке,
- от коэффициента трения в цепочке,
- от длины цепочки,
- от характерного размера устоявшегося полярона в цепочке, который обусловлен безразмерными параметрами связи электрона и решётки в цепочке.

В зависимости от указанных параметров, полярон может двигаться как от начального возбуждения, так и к нему. Причём, при наличии правильно подобранных смещений сайтов или скоростей сайтов в начальный момент времени, полярон может двигаться в нужную сторону. С увеличением скорости или величины смещений сайтов, использованных для формирования локализованного возбуждения, увеличивается скорость и расстояние, на которое смещается полярон. Но это возможно и выполняется

только для таких локализованных возбуждений, которые почти не нарушают начальную форму полярона.

Полученные результаты открывают широкие возможности по управлению переносом в ДНК – проводках и нанобиоэлектронных устройствах на основе ДНК.

Работа поддержана грантами РФФИ №16-07-00305, РФФИ №16-11-10163. Авторы выражают благодарность МСЦ РАН за предоставленные вычислительные ресурсы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shinwari M.W., Deen M.J., Starikov E.B. and Cuniberti G. Electrical Conductance in Biological Molecules. *Advanced Functional Materials*. 2010. V. 20. № 12. P. 1865–1883.
2. Starikov E.B. Electron–phonon coupling in DNA: a systematic study. *Philosophical Magazine*. 2005. V. 85. P. 3435–3462.
3. Zamora-Sillero E., Shapovalov A.V., Esteban F.J. Formation, control, and dynamics of N localized structures in the Peyrard-Bishop model. *Phys. Rev. E*. 2007. V. 76. P. 066603.
4. Maniadis P., Kalosakas G., Rasmussen K.O., Bishop A.R. ac conductivity in a DNA charge transport model. *Phys. Rev. E*. 2005. V. 72. P. 021912.
5. Komineas S., Kalosakas G., Bishop A.R. Effects of intrinsic base-pair fluctuations on charge transport in DNA. *Phys. Rev. E*. 2002. V. 65. P. 061905.
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.
7. Шигаев А.С., Пономарев О.А., Лахно В.Д. Теоретические и экспериментальные исследования открытых состояний ДНК. *Математическая биология и биоинформатика*. 2013. Т. 8. № 2. С. 553–664. doi: 10.17537/2013.8.553
8. Lakhno V.D. DNA nanobioelectronics. *Int. Quantum. Chem*. 2008. V. 108. P. 1970–1981.
9. Nanobioelectronics - for Electronics, Biology and Medicine. Eds. Offenhausser A. Rinald R. N. Y.: Springer, 2009.
10. Taniguchi M., Kawai T. DNA electronics. *Physica E*. 2006. V. 33. P. 1–12.
11. Eudres R.G., Cox D.L., Singh R.R.P. Colloquium: The quest for high-conductance DNA. *Rev. Mod. Phys.* 2004. V. 76. P. 195–214.
12. Porath D., Cuniberti G., Di Felice R. Charge transport in DNA-based devices. *Top. Curr. Chem*. 2004. V. 237. P. 183–227.
13. Lakhno V.D. Soliton-like Solutions and Electron Transfer in DNA. *J. Biol. Phys.* 2000. V. 26. P. 133
14. Fialko N.S., Lakhno V.D. Nonlinear dynamics of excitations in DNA. *Phys. Lett. A*. 2000. V. 278. P. 108.
15. Conwell E.M., Rakhmanova S.V. Polarons in DNA. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2000. V. 97. P. 4556.
16. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Formation of stationary electronic states in finite homogeneous molecular chains. *Math. Biol. Bioinf.* 2010. V. 5. P. 1–29.
17. Лахно В.Д., Фиалко Н.С. Подвижность дырок в однородной нуклеотидной цепочке. *Письма ЖЭТФ*. 2003. Т. 78. С. 786–789.
18. Berashevich J.A., Chakraborty T. Thermodynamics of G.A mispairs in DNA: Continuum electrostatic model. *J. Chem. Phys.* 2009. V. 130. P. 015101.
19. 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.
20. 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.
21. Diaz E., Lima R.P.A., Dominguez-Adame F. Bloch-like oscillations in the

- Peyrard-Bishop-Holstein model. *Phys. Rev. B*. 2008. V. 78. P. 134303.
22. Rakhmanova S.V., Conwell E.M. Polaron Motion in DNA. *J. Phys. Chem. B*. 2001. V. 105. P. 2056.
 23. Berashevich J.A., Bookatz A.D., Chakraborty T. The electric field effect and conduction in the Peyrard-Bishop-Holstein model. *J. Phys.: Condens. Matter*. 2008. V. 20. P. 035207.
 24. Лахно В.Д., Четвериков А.П. Возбуждение бабблов и бризеров в ДНК и их взаимодействие с носителями заряда. *Математическая биология и биоинформатика*. 2014. Т. 9. № 1. С. 4–19. doi: 10.17537/2014.9.4
 25. Chetverikov A.P., Ebeling W., Lakhno V.D., Shigaev A.S., Velarde M.G. On the possibility that local mechanical forcing permits directionally-controlled long-range electron transfer along DNA-like molecular wires with no need of an external electric field - Mechanical control of electrons. *Eur. Phys. J. B*. 2016. V. 89. P. 101.
 26. Hennig D., Starikov E. B., Archilla J. F. R., Palmero F. Charge Transport in Poly(dG)–Poly(dC) and Poly(dA)–Poly(dT) DNA Polymers. *Journal of Biological Physics*. 2004. V. 30. № 3. P. 227.
 27. Starikov E. B., Lewis J. P., Sankey O. F. Base sequence effects on charge carrier generation in DNA: a theoretical study. *International Journal of Modern Physics B*. 2005. V. 19. № 29. P. 4331–4357.
 28. Коршунова А.Н., Лахно В.Д. Особенности движения полярона в молекулярных полинуклеотидных цепочках конечной длины. *Математическая биология и биоинформатика*. 2016. Т. 11. № 2. С. 141–158. doi: 10.17537/2016.11.141
 29. Peyrard M., Bishop A.R. Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation. *Phys. Rev. Lett*. 1989. V. 62. P. 2755–2758.
 30. 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.
 31. Peyrard M. Using DNA to probe nonlinear localized excitations? *Europhys. Lett*. 1998. V. 44. P. 271–277.
 32. Choi C.H., Kalosakas G., Rasmussen K.O., Hiromura M., Bishop A.R., Usheva A. DNA dynamically directs its own transcription initiation. *Nucleic Acids Res*. 2004. V. 32. № 4. P. 1584–1590.
 33. Holstein T. Studies of polaron motion: Part I. The molecular-crystal model. *Annals of Phys*. 1959. V. 8. P. 325–342.
 34. Holstein T. Studies of polaron motion: Part II. The “small” polaron. *Annals of Phys*. 1959. V. 8. P. 343–389.
 35. Shigaev A.S., Ponomarev O.A., Lakhno V.D. A new approach to microscopic modeling of a hole transfer in heteropolymer DNA. *Chemical Physics Letters*. 2011. V. 513. P. 276–279.

Рукопись поступила в редакцию 27.04.2017.

Дата опубликования 05.06.2017.