Математическая биология и биоинформатика
2019. Т. 14. № 2. С. 477–487. doi: /10.17537/2019.14.477

=================МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ =================

Два типа осцилляций холстейновского полярона, равномерно движущегося в полинуклеотидной цепочке в постоянном электрическом поле

Коршунова А.Н.*, Лахно В.Д.**

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

Аннотация. В связи с развитием молекулярной нанобиоэлектроники, основной задачей которой является конструирование электронных устройств на основе биологических молекул, всё больший интерес вызывают проблемы транспорта заряда в таких протяжённых молекулах, как ДНК. Актуальность изучения движения зарядов в одномерных молекулярных цепочках, в первую очередь, связана с возможностью их использования в качестве проводов в наноэлектронных устройствах. Носителями тока в одномерных цепочках являются самозахваченные электронные состояния, которые имеют вид поляронных образований. В представленной работе мы исследуем движение холстейновского полярона в процессе его равномерного движения по цепочке в постоянном электрическом поле. Известно, что при равномерном движении по цепочке в слабом электрическом поле полярон испытывает небольшие колебания своей формы. Эти колебания связаны с дискретностью цепочки и обусловлены наличием в дискретной цепочке потенциала Пайерлса – Набарро. Проведённые ранее исследования показывают, что при определённых параметрах цепочки, существует возможность равномерного движения заряда в постоянном электрическом поле на очень большие расстояния. Движение заряда с постоянной скоростью возможно для небольших значений напряжённости электрического поля. С увеличением значения напряжённости электрического поля заряд переходит в колебательный режим движения с блоховскими осцилляциями. Проведённые в данной работе вычисления показали, что элементы блоховских осцилляций появляются и при стационарном движении полярона по цепочке. Таким образом показано, что, равномерно движущийся по цепочке в постоянном электрическом поле холстейновский полярон, испытывает не только колебания Пайерлса – Набарро, но и малоамплитудные колебания с блоховским периодом.

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

ВВЕДЕНИЕ

Интерес к моделированию движения заряженной частицы в молекулярных цепочках различного типа связан с множеством возможных практических приложений таких цепочек в нанобиоэлектронике [1]–[14]. Например, рассматривается возможность использования таких цепочек в качестве нанопроводов в нанобиоэлектронных

*alya@impb.ru
**lak@impb.ru

устройствах [15]–[19]. Рассматривается возможность создания на основе ДНК нанобиочипов [20] и других приборов нанометрового масштаба. Во многих работах основным носителем тока в синтетических полинуклеотидных последовательностях считается полярон [21]–[25].

В представленной работе проведено исследование стационарного режима движения полярона в дискретной молекулярной цепочке. Моделирование движения полярона проведено при наличии постоянного электрического поля на основе модели Холстейна [26, 27]. Проведенные исследования показывают, что в рассматриваемой системе могут реализоваться сложные динамические режимы, которые зависят от множества всех выбранных параметров системы: от частоты, от коэффициента трения, от длины цепочки, от характерного размера устоявшегося полярона в цепочке, который обусловлен безразмерными параметрами связи электрона и решётки в цепочке [28]–[30]. Показано также [30], что, изменяя только начальное распределение заряда и величину напряжённости электрического поля, можно наблюдать самые разнообразные режимы движения и распределения заряда в цепочке.

Возможность равномерного движения заряда в однородной холстейновской цепочке в постоянном электрическом поле на очень большие расстояния была показана в работах [28]–[30]. Показано, что движение заряда с постоянной скоростью возможно для небольших значений напряженности электрического поля. С увеличением значения напряженности электрического поля заряд переходит в колебательный режим движения с блоховскими осцилляциями. Кроме того, в работе [29] было показано, что при равномерном движении по цепочке в слабом электрическом поле полярон испытывает небольшие колебания своей формы связанные с дискретностью цепочки и обусловленные наличием в дискретной цепочке потенциала Пайерлса – Набарро.

Таким образом ранее были исследованы колебания формы полярона в процессе его равномерного движения по цепочке в постоянном электрическом поле – колебания Пайерлса – Набарро. Блоховские осцилляции полярона рассматривались в процессе его колебательного режима движения в постоянном электрическом поле [31], [30]. В данной работе показано, что элементы блоховских осцилляций наблюдаются и при стационарном движении полярона по цепочке. То есть, в процессе равномерного движения по цепочке в постоянном электрическом поле полярон демонстрирует два типа осцилляций: осцилляции Пайерлса – Набарро и малоамплитудные блоховские осцилляции.

ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИСКРЕТНОЙ ХОЛСТЕЙНОВСКОЙ ЦЕПОЧКИ

Динамическое поведение полярона при наличии постоянного внешнего поля в однородной молекулярной цепочке моделируется системой связанных квантово-классических динамических уравнений с диссипацией. В используемой нами модели ДНК рассматривается как однородная цепочка, составленная из N сайтов. Каждый сайт представляет собой нуклеотидную пару, которая рассматривается как гармонический осциллятор [25]. Для моделирования динамики квантовой частицы в цепочке из N нуклеотидных пар будем использовать гамильтониан Холстейна, в котором каждый сайт представляет собой двухатомную молекулу [26, 27]:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Система нелинейных дифференциальных уравнений (5), (6) решается методами (a) – типа Рунге – Кутта 4-го порядка и (b) – явного 4-шагового метода Адамса – Бэшфорта на этапе предсказания и расчетом поправки 3-шаговым методом Адамса – Мултона. Расчёты выполнялись с использованием вычислительных средств МСЦ РАН.

НАЧАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

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

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

$$|\,b_n(0)| = \frac{\sqrt{2}}{4}\sqrt{\frac{\varkappa}{|\,\eta|}}\,\mathrm{ch}^{-1}\Big(\frac{\varkappa(n-n_0)}{4|\,\eta|}\Big),\qquad (7)$$
$$u_n(0) = |\,b_n(0)|^2/\omega^2,\ \ du_n(0)/d\tilde{t} = 0.$$

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

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

Полярон, соответствующий стационарному решению уравнений (5), (6) в континуальном пределе, не является устоявшимся поляроном для дискретной цепочки с любыми заданными параметрами. Для поляронов большого радиуса (например $d(\tilde{t}) > 15$ при выбранных параметрах цепочки), полярон вида (7) очень близок к устоявшемуся, но от более узких поляронов отличается значительно.

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

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

$$|\,b_n(0)| = \frac{\sqrt{2}}{4}\sqrt{\frac{\varkappa}{\xi|\,\eta|}}\,\mathrm{ch}^{-1}\Big(\frac{\varkappa(n-n_0)}{4\xi|\,\eta|}\Big),\qquad (9)$$

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

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

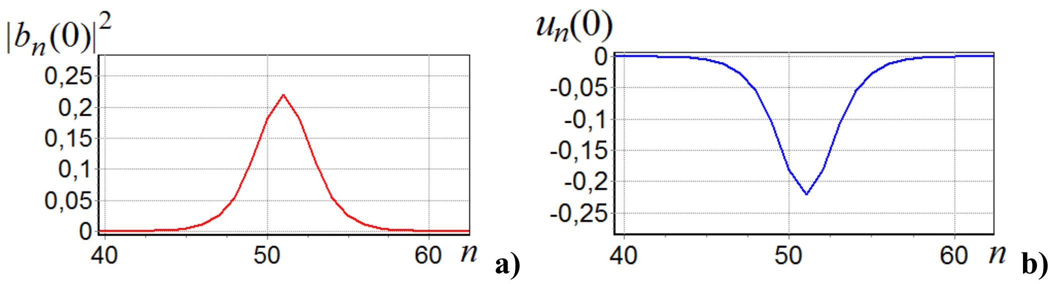

Рис. 1. Графики функций $|b_n(0)|^2$ и $u_n(0)$ для устоявшегося полярона в центре цепочки длиной $N = 101$ сайт для значений параметров цепочки $\varkappa = 4$ и $\eta = 2.4$.

Для моделирования движения полярона в постоянном электрическом поле будем помещать в цепочку начальное поляронное состояние вида (9) при нужных значениях коэффициента растяжения ξ. Центр полярона поместим на сайт цепочки с номером n_0. Значение n_0 выбирается так, чтобы в начале вычислений полярон был достаточно далеко от концов цепочки. Длина цепочки подбирается так, чтобы в конце вычислений полярон не подошел слишком близко к концу цепочки. Поле включается "мгновенно" в начальный момент времени.

КОЛЕБАНИЯ ПАЙЕРЛСА – НАБАРРО В ПРОЦЕССЕ РАВНОМЕРНОГО ДВИЖЕНИЯ ПОЛЯРОНА ПО ЦЕПОЧКЕ В ПОСТОЯННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Ранее в работах [29], [30] нами было показано, что при определённых параметрах цепочки существует возможность равномерного движения заряда в холстейновской молекулярной цепочке в постоянном электрическом поле на очень большие расстояния для небольших значений напряженности электрического поля. С увеличением значения напряженности электрического поля заряд переходит в колебательный режим движения с блоховскими осцилляциями.

В работе [29] было показано, что при равномерном движении по цепочке в слабом электрическом поле полярон испытывает небольшие колебания своей формы с периодом $T_{PN} = 1/V$, где V – это скорость движения полярона. Эти колебания связаны с дискретностью цепочки и обусловлены наличием в дискретной цепочке потенциала Пайерлса – Набарро. Амплитуда этих осцилляций обращается в ноль в континуальном пределе, когда размер полярона намного превышает расстояние между соседними сайтами. То есть равномерное движение полярона сопровождается колебаниями его формы в той области значений параметров, при которых размер полярона становится сравним с постоянной решетки. Для численного расчета скорости полярона V использовались соотношения: $V = dX/d\widetilde{t}$, $X(\widetilde{t}) = \sum_n |b_n(\widetilde{t})|^2 \cdot n$.

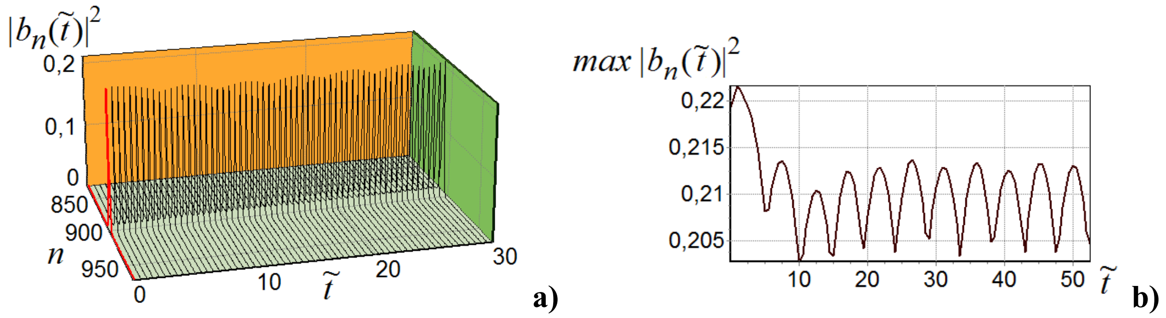

Рис. 2. Колебания Пайерлса – Набарро при движении полярона в постоянном электрическом поле напряжённостью $E = 0.018$. Графики функций $|b_n(\widetilde{t})|^2$ и максимума $|b_n(\widetilde{t})|^2$ показаны в процессе равномерного движения полярона в цепочке с параметрами $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$ и длиной $N = 1101$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте с номером $n_0 = 900$.

На рисунке 2 показаны графики функций $|b_n(\widetilde{t})|^2$ (рис. 2,a) и максимальные значения функций $|b_n(\widetilde{t})|^2$ (рис. 2,b) в процессе равномерного движения полярона по цепочке в постоянном электрическом поле с напряжённостью $E = 0.018$. В представленном примере были выбраны следующие значения параметров цепочки: $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$. Начальные значения $|b_n(0)|$ выбраны в форме обратного гиперболического косинуса вида (9) при $\xi = 0.95$, такой полярон максимально близок к устоявшемуся полярону в цепочке. Длина цепочки $N = 1101$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 900$. При выбранных значениях параметров $\varkappa = 4$ и $\eta = 2.4$, характерный размер полярона в цепочке $d(\tilde{t}) \approx 6.88$. Таким образом, характерный размер полярона в рассматриваемом случае не слишком большой, и колебания формы полярона, обусловленные наличием в дискретной цепочке потенциала Пайерлса – Набарро, вполне заметны. Смещения сайтов цепочки в рассматриваемом примере соответствуют вероятностям распределения заряда по цепочке, то есть указанные колебания наблюдаются и в смещениях сайтов цепочки.

Безразмерная скорость равномерного движения полярона в поле напряжённостью $E = 0.018$ равна $V = dX/d\widetilde{t} \approx 0.2146$. Этой скорости соответствует период колебаний Пайерлса – Набарро $T_{PN} = 1/V \approx 4.66$. График максимальных значений функций $|b_n(\widetilde{t})|^2$, представленный на рисунке 2,b, показывает хорошее соответствие наблюдаемого периода колебаний с периодом колебаний Пайерлса – Набарро, вычисленным по формуле $T_{PN} = 1/V$.

Напомним, что в процессе колебательного режима движения в постоянном электрическом поле полярон испытывает блоховские осцилляции ([31], [30]). В процессе равномерного движения по цепочке в постоянном электрическом поле полярон испытывает колебания Пайерлса – Набарро, обусловленные дискретностью цепочки ([29]). Далее будет показано, что в процессе равномерного движения полярона по цепочке, полярон испытывает не только колебания Пайерлса – Набарро, но и небольшие осцилляции с блоховским периодом, а также в структуре полярона чётко наблюдается максимальная блоховская амплитуда, соответствующая заданному значению напряжённости электрического поля.

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

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

Рассмотрим подробнее распределение по цепочке начального полярона в процессе его равномерного движения в электрическом поле напряжённостью $E = 0.018$. Рисунок 3 демонстрирует графики функций $X(\widetilde{t}), X'(\widetilde{t}), |b_n(\widetilde{t})|^2$, которые характеризуют движение и распределение полярона по цепочке в электрическом поле напряжённостью $E = 0.018$. Начальные значения $|b_n(0)|$ были выбраны в форме обратного гиперболического косинуса вида (9) при $\xi = 0.95$, такой полярон максимально близок к устоявшемуся полярону в цепочке. Длина цепочки $N = 1101$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 900$.

На рисунке 3,a показан график функции $X(\widetilde{t})$, описывающий положение центра масс полярона, для значения напряжённости электрического поля $E = 0.018$, $X(\widetilde{t}) = \sum_n |b_n(\widetilde{t})|^2 \cdot n$. График функции $X(\widetilde{t})$ на рисунке 3,a демонстрирует линейную зависимость от $\widetilde{t}$ для указанного значения напряжённости электрического поля $E = 0.018$ на протяжении безразмерного времени $\widetilde{t} > 1500$, следовательно, при выбранном значении напряжённости электрического поля наблюдается равномерное движение.

Для выбранного значения напряжённости электрического поля $E = 0.018$ период блоховских осцилляций $T_{BL} = 2\pi/E \approx 349$. Максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} = 4\eta/E \approx 533$. Представленные на рисунке 3 графики демонстрируют, что основные характеристики блоховских осцилляций приблизительно соблюдаются. График функции $X'(\widetilde{t})$ на рисунке 3,b демонстрирует период блоховских осцилляций, примерно

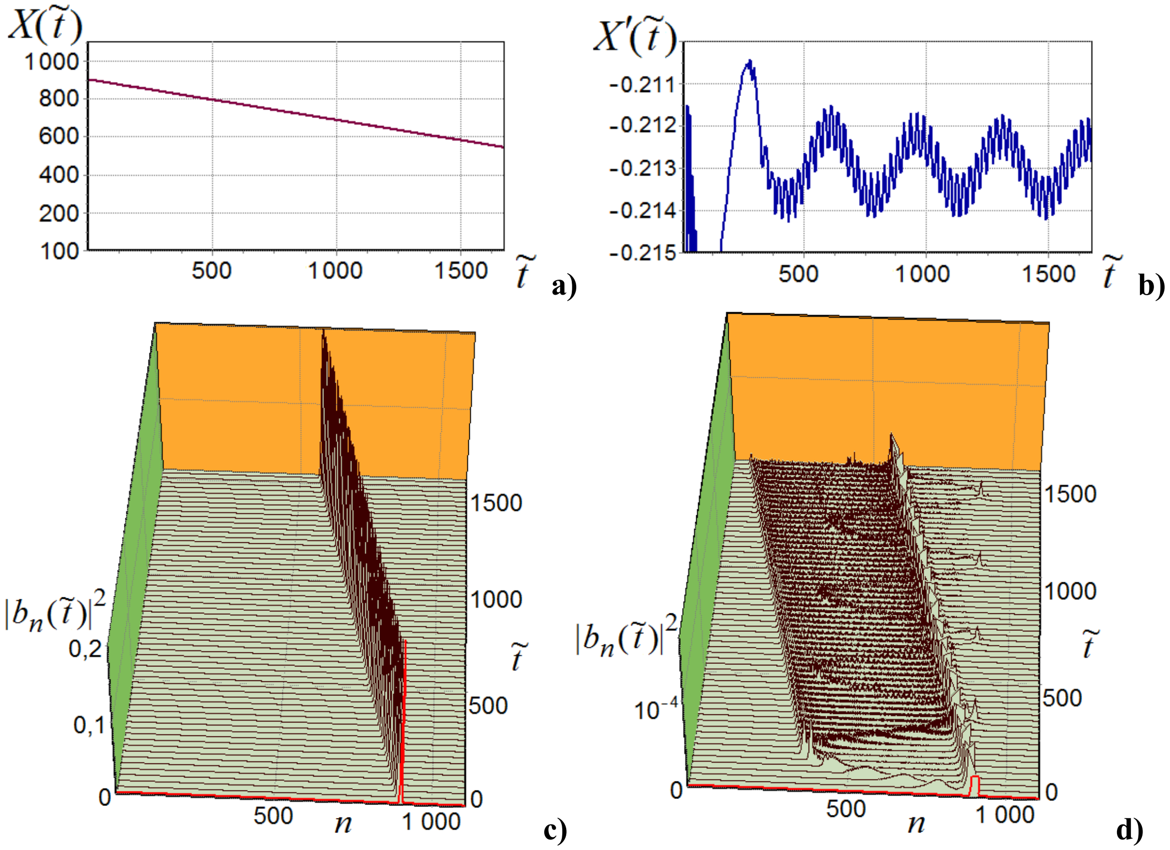

Рис. 3. Равномерное движение полярона в постоянном электрическом поле напряжённостью $E = 0.018$. Графики функций $X(\widetilde{t}), X'(\widetilde{t}), |b_n(\widetilde{t})|^2$ иллюстрируют процесс движения полярона в цепочке с параметрами $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$ и длиной $N = 1101$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 900$.

равный теоретическому периоду: $T_{BL} \approx 349$. Амплитуда колебаний функции $X'(\widetilde{t})$ очень маленькая. При этом графики функций $X(\widetilde{t})$ на рисунке 3,a и $|b_n(\widetilde{t})|^2$ на рисунке 3,c указывают на равномерное движение полярона по цепочке.

На рисунке 3,d показан тот же график функции $|b_n(\widetilde{t})|^2$, что и на рисунке 3,c, но в другом масштабе. Метка на левой шкале указывает значение 10^{-4}. Кроме того, на график выводятся только те значения функции $|b_n(\widetilde{t})|^2$, которые меньше величины $5 \cdot 10^{-5}$. Значения $|b_n(\widetilde{t})|^2 > 5 \cdot 10^{-5}$ на рисунке 3,d как бы обрезаны для того, чтобы были видны малоамплитудные составляющие функции $|b_n(\widetilde{t})|^2$.

График функции $|b_n(\widetilde{t})|^2$ на рисунке 3,d показывает, что, в самый начальный период времени, примерно равный половине блоховского периода, за безразмерное время $\widetilde{t} \approx 175 \approx 349/2$, малоамплитудная часть полярона выдвигается перед макрочастью полярона по направлению движения полярона на ширину по сайтам примерно равную максимальной блоховской амплитуде $A_{BL} \approx 533$. В течение второй половины блоховского периода от начала движения эта вышедшая перед поляроном часть, возвращается к начальному положению центра полярона. За этот первый блоховский период центр полярона прошёл несколько сайтов, и, так как мы обрезали бóльшую часть полярона, мы можем видеть, что вышедшее перед поляроном возбуждение прошло назад через макрочасть полярона именно до начального положения центра полярона. Заметим, что при колебательном режиме движения заряда по цепочке в начальный период времени заряд тоже смещается примерно на максимальную блоховскую амплитуду, но в этом случае смещается и центр масс заряда примерно на ту же величину. При дальнейшем движении полярона по цепочке это начальное возбуждение совершает колебания с блоховским периодом, находясь на сайтах цепочки, расположенных примерно от центра начального полярона до максимальной блоховской амплитуды в сторону по направлению поля.

На рисунке 3,d хорошо видно, как за первую половину первого блоховского периода перед поляроном выходит малоамплитудное возбуждение. Но в течение второй половины первого блоховского периода назад возращается только часть возбуждения. То есть во второй половине первого блоховского периода мы наблюдаем уже два малоамплитудных возбуждения. Одно из них – начальное возбуждение. Другое возбуждение движется перед поляроном, со скоростью полярона, имеет постоянную ширину распределения по сайтам, равную максимальной блоховской амплитуде для заданного значения электрического поля. Никаких осцилляций во втором малоамплитудном возбуждении не наблюдается. Мы назвали это возбуждение предшествующим.

Предшествующее возбуждение, идущее перед основной частью полярона, формируется за счёт присутствия в цепочке главной части равномерно движущегося полярона, почти сохранившего свою первоначальную форму.

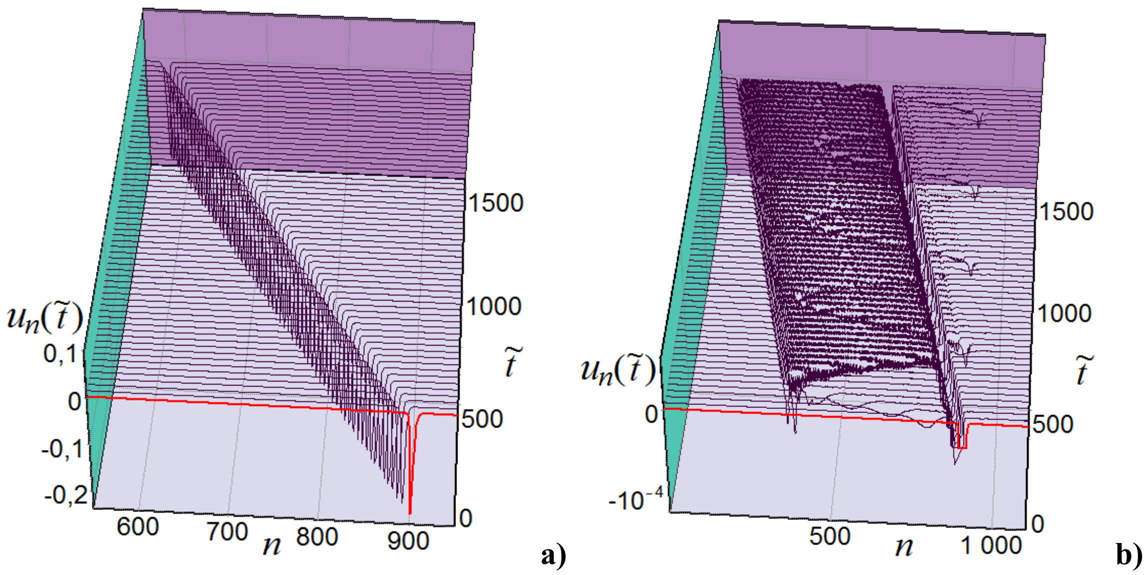

Рис. 4. Показаны графики функций $u_n(\widetilde{t})$ в процессе равномерного движения полярона в цепочке с параметрами $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$ и длиной $N = 1101$ сайтов. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 900$. Напряжённость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

На рисунке 4 показаны графики функций $u_n(\widetilde{t})$, которые показывают смещения сайтов цепочки в том же вычислительном эксперименте, который показан на рисунке 3. На рисунке 4,a показаны графики функций $u_n(\widetilde{t})$ в полную величину по значениям функций. Но нижняя шкала на рисунке 4,a начинается от середины цепочки, так как на полной шкале отрицательные смещения выглядят совсем ненаглядно, хотя в полной шкале видно, что смещения полностью соответствуют положениям функции $|b_n(\widetilde{t})|^2$ на рисунке 3,c. На рисунке 4,b, по аналогии с рисунком 3,d, показаны обрезанные графики функций $u_n(\widetilde{t})$. Нижняя метка на левой шкале равна -10^{-4}.

Из представленных на рисунке 4,b графиков функций $u_n(\widetilde{t})$ следует, что смещения сайтов соответствуют представленным на рисунке 3,d функциям распределения вероятностей $|b_n(\widetilde{t})|^2$. То есть соответствующие малоамплитудные возбуждения наблюдаются и в смещениях сайтов цепочки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящее время имеются эксперименты по поглощению и излучению недопированными полинуклеотидными цепочками длиной в 50 и 100 сайтов терагерцового излучения в квантовых сэндвичевых структурах (см. [32]). Согласно полученным в нашей статье результатам, для допированных ДНК можно ожидать качественно отличных от [32] результатов, обусловленных наличием в них блоховских осцилляций, частота которых может перестраиваться простым изменением напряжённости электрического поля, что открывает новые широкие возможности в наноэлектронике.

В проведённых ранее исследованиях блоховские осцилляции полярона рассматривались только в процессе его колебательного режима движения в постоянном электрическом поле ([31], [30]). В процессе стационарного движения полярона по цепочке в постоянном электрическом поле были показаны колебания Пайерлса – Набарро, обусловленные дискретностью цепочки ([29]).

В данной работе показано, что элементы блоховских осцилляций наблюдаются и при стационарном движении полярона по цепочке. То есть, в процессе равномерного движения по цепочке в постоянном электрическом поле полярон демонстрирует два типа осцилляций: осцилляции Пайерлса – Набарро и малоамплитудные блоховские осцилляции (см. рис. 2 и рис. 3).

Показано, что форма полярона в процессе стационарного движения в постоянном электрическом поле принимает явно выраженную структуру. При этом такие характеристики блоховских осцилляций, как период блоховских осцилляций и максимальная блоховская амплитуда, демонстрируют малоамплитудные составляющие полярона.

Из проведённых вычислений следует, что в процессе равномерного движения полярона по цепочке графики функций $u_n(\widetilde{t})$, показывающие смещения сайтов цепочки, соответствуют функциям распределения вероятностей $|b_n(\widetilde{t})|^2$. Таким образом, малоамплитудные возбуждения наблюдаются и в смещениях сайтов цепочки (см. рис. 4,b и рис. 3,d).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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. doi: 10.1023/B:JOBP.0000046721.92623.a9.
2. Davydov A.S. *Solitons in Molecular systems*. Boston: Reidel Publ. Comp., 1985. P. 413.
3. Scott A.C. Davydov’s soliton. *Phys. Rep.* 1992. V. 217. № 1. P. 1–67. doi: 10.1016/0370-1573(92)90093-F.
4. De Pablo P.J., Moreno-Herrero F., Colchero J., Herrero J. Gómez, Herrero P., Baró A. M., Ordejón Pablo, Soler José M., Artacho Emilio. Absence of dc-Conductivity in λ–DNA. *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 85. P. 4992–4995. doi: 10.1103/PhysRevLett.85.4992.
5. Porath D., Bezryadin A., De Vries S., Dekker C. Direct measurement of electrical transport through DNA molecules. *Nature*. 2000. V. 403. P. 635–638. doi: 10.1038/35001029.
6. Yoo K.-H., Ha D.H., Lee J.-O., ParJ. W.k, Kim Jinhee, Kim J.J., Lee H.-Y., Kawai T., Choi Han Yong. Electrical Conduction through Poly(dA)-Poly(dT) and Poly(dG)-Poly(dC) DNA Molecules. *Phys. Rev. Lett.* 2001. V. 87. P. 198102. doi: 10.1103/PhysRevLett.87.198102.
7. Kasumov A.Yu., Kociak M., Guéron S., Reulet B., Volkov V.T., Klinov D.V., Bouchiat H. Proximity-Induced Superconductivity in DNA. *Science*. 2001. V. 291. № 5502. P. 280–282. doi: 10.1126/science.291.5502.280.
8. 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. doi: 10.1002/adfm.200902066.

9. 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.
10. Peyrard M., Cuesta-Lopez S., James G. Modelling DNA at the mesoscale: a challenge for nonlinear science? *Nonlinearity*. 2008. V. 21. P. 91–100. doi: 10.1088/0951-7715/21/6/T02.
11. Starikov E.B. Electron–phonon coupling in DNA: a systematic study. *Philosophical Magazine.* 2005. V. 85. P. 3435–3462. doi: 10.1080/14786430500157110.
12. 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. doi: 10.1103/PhysRevE.72.021912.
13. 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. doi: 10.1103/PhysRevE.65.061905.
14. Chepeliaskii A.D., Klinov D., Kasumov A., Guéron S., Pietrement O., Lyonnais S., Bouchiat H. Conduction of DNA molecules attached to a disconnected array of metallic Ga nanoparticles. *New J. Phys.* 2011. V. 13. P. 063046. doi: 10.1088/1367-2630/13/6/063046.
15. Lakhno V.D. DNA nanobioelectronics. *Int. Quantum. Chem*. 2008. V. 108. P. 1970–1981. doi: 10.1002/qua.21717.
16. *Nanobioelectronics – for Electronics, Biology and Medicine*. Eds. Offenhausser A., Rinald R. N.-Y.: Springer-Verlag, 2009.
17. Eudres R.G., Cox D.L., Singh R.R.P. Colloquium: The quest for high-conductance DNA. *Rev. Mod. Phys.* 2004. V. 76. P. 195–214. doi: 10.1103/RevModPhys.76.195.
18. Taniguchi M., Kawai T. DNA electronics. *Physica E.* 2006. V. 33. P. 1–12. doi: 10.1016/j.physe.2006.01.005.
19. Porath D., Cuniberti G., Di Felice R. Charge transport in DNA-based devices. *Top. Curr. Chem.* 2004. V. 237. P. 183–227. doi: 10.1007/b94477.
20. Lakhno V.D., Sultanov V.B. On the Possibility of Electronic DNA Nanobiochips. *J. Chem. Theory Comput.* 2007. V. 3. P. 703-705 doi: 10.1021/ct6003438.
21. Conwell E.M., Rakhmanova S.V. Polarons in DNA. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2000. V. 97. P. 4556–4560. doi: 10.1073/pnas.050074497.
22. Maniadis P., Kalosakas G., Rasmussen K.Ø., Bishop A.R. Polaron normal modes in the Peyrard-Bishop-Holstein model. *Phys. Rev. B.* 2003. V. 68. P. 174304. doi: 10.1103/PhysRevB.68.174304.
23. 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. doi: 10.17537/2010.5.1.
24. Астахова Т.Ю., Виноградов Г.А. Полярон в электрическом поле и колебательный спектр полиацетилена. *Математическая биология и биоинформатика*. 2019. Т. 14. № 1. С. 150–159. doi: 10.17537/2019.14.150.
25. Lakhno V.D. Soliton-like Solutions and Electron Transfer in DNA. *J. Biol. Phys.* 2000. V. 26. P. 133–147. doi: 10.1023/A:1005275211233.
26. Holstein T. Studies of polaron motion: Part I. The molecular-crystal model. *Annals of Phys.* 1959. V. 8. P. 325–342. doi: 10.1016/0003-4916(59)90002-8.
27. Holstein T. Studies of polaron motion: Part II. The “small” polaron. *Annals of Phys.* 1959. V. 8. P. 343–389. doi: 10.1016/0003-4916(59)90003-X.
28. 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. doi: 10.1016/j.physe.2014.02.025.
29. 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. doi: 10.1140/epjb/e2010-10565-2.

30. Коршунова А.Н., Лахно В.Д. Моделирование стационарных и нестационарных режимов движения заряда в однородной холстейновской цепочке в постоянном электрическом поле. *Журнал технической физики*. 2018. Т. 88. № 9. С. 1312–1319. doi: 10.21883/JTF.2018.09.46414.14-18.
31. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Bloch oscillations of a soliton in a molecular chain. *Eur. Phys. J. B*. 2007. V. 55. P. 85. doi: 10.1140/epjb/e2007-00045-3.
32. Баграев Н.Т., Чернев А.Л., Клячкин Л.Е., Маляренко А.М., Емельянов А.К., Дубина М.В. Терагерцевый отклик олигонуклеотидов ДНК на поверхности кремниевых наноструктур. *Физика и техника полупроводников*. 2016. Т. 50. № 9. С. 1230 – 1237.

Рукопись поступила в редакцию 02.08.2019.

Переработанный вариант поступил 17.10.2019.

Дата опубликования 29.10.2019.