

===== ПЕРЕВОДЫ ОПУБЛИКОВАННЫХ СТАТЕЙ =====

## **Зависимость движения заряда в постоянном электрическом поле в полинуклеотидных цепочках от значения константы связи заряда со смещениями цепочки**

**Коршунова А.Н.\* , Лахно В.Д.†**

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

**Аннотация.** В представленной работе мы исследуем различные режимы движения заряда по цепочке в постоянном электрическом поле. Моделирование движения заряда по цепочке в постоянном электрическом поле было проведено на основе модели Холстейна. Проведённые ранее исследования показывают возможность равномерного движения заряда в постоянном электрическом поле на очень большие расстояния. При небольших значениях напряжённости электрического поля холстейновский полярон может двигаться с постоянной скоростью. С увеличением значения напряжённости электрического поля заряд переходит в колебательный режим движения с блоховскими осцилляциями. Так как движение заряда зависит от всего множества параметров системы, то и характер движения заряда зависит не только от значения напряжённости электрического поля. Поэтому и напряжённость электрического поля, при котором существует равномерное движение, различается для цепочек с различными параметрами. В данной работе был рассмотрен характер движения и распределения заряда в цепочках с различными значениями константы связи заряда со смещениями цепочки. Было показано, что значения напряжённости электрического поля при которых происходит смена режима движения заряда различные в цепочках с различными значениями константы связи. Показано также, что при одном и том же значении напряжённости электрического поля, в цепочках с различными значениями константы связи можно наблюдать или равномерное движение, или колебательный режим движения, или неподвижный полярон.

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

### **ВВЕДЕНИЕ**

Выяснению механизмов электронного транспорта в ДНК, как важнейшей проблеме нанобиоэлектроники посвящено большое количество теоретических и

---

\*alya@impb.ru

†lak@impb.ru

экспериментальных работ [1]–[17]. Особый интерес представляет изучение переноса заряда в ДНК при наличии электрического поля [18]–[25].

В представленной работе моделирование движения заряда по цепочке при наличии постоянного электрического поля было проведено на основе модели Холстейна [26, 27]. Моделирование движения заряда даже в однородной полинуклеотидной цепочке является многопараметрической задачей. Поэтому, несмотря на простоту выбранной модели, в рассматриваемой системе могут реализоваться разнообразные и сложные динамические режимы. Характер движения и распределения заряда по цепочке зависит от множества параметров системы: от каждого из параметров цепочки, от величины напряженности электрического поля, от начального распределения заряда в цепочке.

Проведенные ранее исследования ([18], [22], [24]) показывают, что равномерное движение полярона по цепочке возможно для небольших значений напряженности электрического поля. В работе [28] была показана возможность равномерного движения полярона в однородной холстейновской цепочке в постоянном электрическом поле на очень большие расстояния. При больших значениях напряженности электрического поля равномерного движения не наблюдается, заряд теряет свою первоначальную форму и движется по цепочке в направлении поля в режиме колебательного движения с блоховскими осцилляциями. Но характер движения заряда по цепочке зависит не только от значения напряженности электрического поля, но и от заданных параметров цепочки и даже от начального распределения заряда.

В представленной работе мы исследуем движение заряда в постоянном электрическом поле в полинуклеотидных цепочках с различными значениями константы связи заряда со смещениями цепочки. При этом значения других параметров цепочки не изменялись. В процессе равномерного движения по цепочке заряд движется по цепочке сохраняя свою форму. В этом случае можно сказать, что по цепочке двигается полярон. В данной работе показана зависимость скорости равномерно движущегося полярона от значения константы связи заряда со смещениями цепочки. В процессе колебательного режима движения заряд теряет свою первоначальную форму и движется по цепочке в направлении поля совершая блоховские осцилляции. В этом случае рассматривались мгновенная и средняя скорость движения заряда и их зависимость от значения константы связи.

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И НАЧАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

Моделирование движения заряда в однородной молекулярной цепочке при наличии постоянного электрического поля проведено на основе модели Холстейна [26, 27]. В рамках данной модели ДНК рассматривается как однородная цепочка, составленная из  $N$  сайтов. Каждый сайт представляет собой нуклеотидную пару, которая рассматривается как гармонический осциллятор [17]. Движение заряда в постоянном электрическом поле моделируется системой связанных квантово-классических динамических уравнений с диссипацией. Динамика электрона описывается линейным уравнением Шрёдингера, а динамика сайтов с учётом диссипации описывают классические уравнения движения.

Для моделирования динамики квантовой частицы в цепочке из  $N$  нуклеотидных пар будем использовать гамильтониан Холстейна, в котором каждый сайт представляет собой двухатомную молекулу:

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

где  $\nu$  – матричный элемент перехода заряда между соседними сайтами (нуклеотидными парами),  $\alpha$  – константа взаимодействия заряда со смещениями  $q_n$ ,  $M$  – эффективная масса

сайта,  $k$  – упругая постоянная,

$e$  – заряд электрона,  $\mathcal{E}$  – напряженность электрического поля.

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

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

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

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

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 учетом диссипации.

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

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

где  $\tau$  – произвольный масштаб времени, связывающий время  $t$  и безразмерную переменную  $\tilde{t}$ ,  $\tilde{t} = t/\tau$ ,  $\tau = 10^{-14}$  сек (произвольный масштаб времени).

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

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

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

где  $b_n$  – амплитуды вероятности локализации заряда на  $n$ -ом сайте,  $\sum_n |b_n(\tilde{t})|^2 = 1$ ,  $\eta$  – матричные элементы перехода по сайтам,  $\omega$  – частота колебаний  $n$ -го сайта,  $\kappa$  – константа связи,  $\omega'$  – коэффициент трения,  $u_n$  – смещения сайтов из равновесных положений,  $E$  – напряженность электрического поля. В размерных единицах напряжённость электрического поля  $\mathcal{E} \approx E \cdot 1.88 \cdot 10^6$  В/см.

Введенная таким образом модель, описывающая динамику заряженной частицы в полинуклеотидной цепочке, в явном виде учитывает диссипацию в рассматриваемой системе.

Система нелинейных дифференциальных уравнений (5), (6) решается методом Рунге – Кутты 4-го порядка. Расчеты выполнялись с использованием вычислительных средств МСЦ РАН.

При отсутствии электрического поля система уравнений (5), (6) в континуальном пределе имеет стационарное решение в виде обратного гиперболического косинуса:

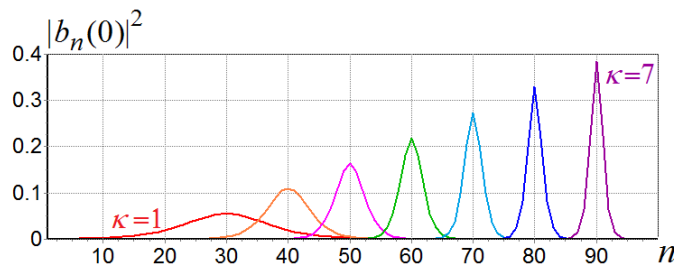
$$\begin{aligned} |b_n(0)| &= \frac{\sqrt{2}}{4} \sqrt{\frac{\kappa}{|\eta|}} \operatorname{ch}^{-1} \left( \frac{\kappa(n - n_0)}{4|\eta|} \right), \\ u_n(0) &= |b_n(0)|^2 / \omega^2, \quad du_n(0)/d\tilde{t} = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

В представленной работе мы исследуем движение заряда в постоянном электрическом поле в полинуклеотидных цепочках с различными значениями константы связи  $\kappa$ .

Для моделирования движения заряда будем использовать фиксированные значения следующих параметров: матричные элементы перехода по сайтам  $\eta = 2.4$ , частота колебаний сайтов  $\omega = 1$ , коэффициент трения  $\omega' = 1$ .

Для моделирования движения полярона в постоянном электрическом поле будем помещать в цепочку начальное поляронное состояние вида (7). Центр полярона поместим на сайт цепочки с номером  $n_0$ . Значение  $n_0$  выбирается так, чтобы в начале вычислений полярон был достаточно далеко от концов цепочки. Аналогично и длина цепочки подбирается так, чтобы и в конце вычислений полярон не подошел слишком близко к концу цепочки. Движение заряда в электрическом поле моделируется в однородной незамкнутой цепочке имеющей два конца. Поле включается "мгновенно" в начальный момент времени.

На рисунке 1 показаны семь графиков функций  $|b_n(0)|^2$  вида (7) в цепочке длиной  $N = 100$  сайтов для различных значений константы связи  $\kappa = 1, 2, \dots, 7$ . В представленном примере были выбраны следующие безразмерные значения параметров цепочки:  $\eta = 2.4$ ,  $\omega = 1$ ,  $\omega' = 1$ . Представленные на рисунке 1 графики функций  $|b_n(0)|^2$  наглядно демонстрируют зависимость начального поляронного состояния вида (7) от значения константы связи  $\kappa$ .



**Рис. 1.** Графики функций  $|b_n(0)|^2$  вида (7) в цепочке длиной  $N = 100$  сайтов для различных значений константы связи  $\kappa = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$ .

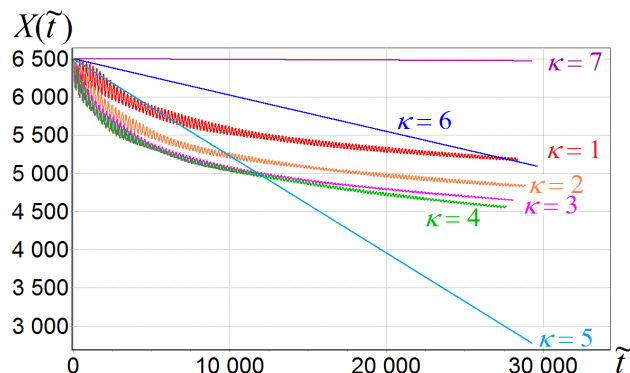
Функции  $|b_n(0)|^2$  вида (7) являются решением системы уравнений (5), (6) в непрерывном пределе, но для дискретных цепочек это решение является лишь приближением к функции  $|b_n|^2$  в дискретной цепочке при отсутствии электрического поля и внешних возбуждений. То есть форма полярона в дискретной цепочке несколько отличается от начального поляронного состояния вида (7). Для цепочек с небольшими значениями константы связи  $\kappa \leq 4$  при заданных значениях матричных элементов перехода по сайтам  $\eta = 2.4$  функции  $|b_n(0)|^2$  вида (7) практически совпадают с формой полярона в дискретной цепочке. В цепочках с константой связи  $\kappa \geq 5$  дискретный полярон несколько выше и уже функции  $|b_n(0)|^2$  вида (7), но в данном исследовании это не имеет принципиального значения, поэтому мы будем использовать в качестве начального поляронного состояния функции  $|b_n(0)|^2$  вида (7).

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

## РАВНОМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ ПОЛЯРОНА И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЙ РЕЖИМ ДВИЖЕНИЯ ЗАРЯДА

На рисунке 2 представлены примеры эволюции заряда из начального поляронного состояния вида (7) в семи цепочках с различными значениями константы связи  $\kappa$ . Графики

начального поляронного состояния вида (7) для каждого значения константы связи  $\kappa$  показаны на рисунке 1. Как было указано выше, одинаковыми во всех цепочках заданы значения следующих параметров: матричные элементы перехода по сайтам  $\eta = 2.4$ , частота колебаний сайтов  $\omega = 1$ , коэффициент трения  $\omega' = 1$ . Начальные значения  $|b_n(0)|$  заданы в форме обратного гиперболического косинуса вида (7), центр которого находится на сайте цепочки с номером  $n_0 = 6500$ . Длина цепочки  $N = 7001$  сайт.



**Рис. 2.** Графики функций  $X(\tilde{t})$  для различных значений константы связи  $\kappa = 1, 2, \dots, 7$ . Длина цепочки  $N = 7001$  сайт. Центр начального поляронного состояния вида (7)  $n_0 = 6500$ . Значения параметров цепочки  $\eta = 2.4$ ,  $\omega = 1$ ,  $\omega' = 1$ . Значение напряжённости электрического поля  $E = 0.03$ .

На рисунке 2 показаны графики функции  $X(\tilde{t})$ , описывающей положение центра масс заряда, для значения напряжённости электрического поля  $E = 0.03$ ,  $X(\tilde{t}) = \sum_n |b_n(\tilde{t})|^2 \cdot n$ .

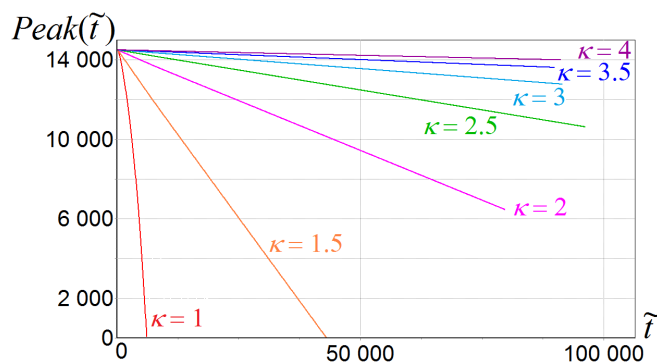
Графики функции  $X(\tilde{t})$  на рисунке 2 в цепочках с большими значениями  $\kappa = 5, 6, 7$  демонстрирует линейную зависимость от  $\tilde{t}$  для указанного значения напряжённости электрического поля  $E = 0.03$  на протяжении безразмерного времени  $\tilde{t} \approx 30000$ , следовательно, при выбранном значении напряжённости электрического поля наблюдается равномерное движение в цепочках с указанными значениями константы связи  $\kappa$ , при этом заряд движется по цепочке, сохраняя свою первоначальную форму, то есть в этих случаях наблюдается равномерное движение именно полярона. Из представленных на рисунке 2 графиков функций  $X(\tilde{t})$  для  $\kappa = 5, 6, 7$  следует, что скорость движения полярона в процессе его равномерного движения по цепочке возрастает при уменьшении константы связи  $\kappa$ .

В цепочках с меньшими значениями константы связи  $\kappa = 1, 2, 3, 4$ , заряд сразу переходит в колебательный режим движения, далее мы покажем, что заряд совершает блоховские осцилляции. В процессе колебательного движения по цепочке заряд быстро теряет свою первоначальную форму и, распределяясь по цепочке, двигается в направлении поля. Графики функций  $X(\tilde{t})$  для  $\kappa = 1, 2, 3, 4$  на рисунке 2 показывают, что скорость движения заряда в колебательном режиме движения было бы некорректно сравнивать со скоростью равномерно движущегося полярона для  $\kappa = 5, 6, 7$ . Можно заметить только, что за время вычислений, показанное на рисунке 2, на большее расстояние продвинулся заряд в цепочке с большим значением  $\kappa = 4$ . При уменьшении константы связи  $\kappa$ , при  $\kappa \rightarrow 0$ , общая скорость движения заряда стремится к нулю, заряд, сохраняя свою форму, совершает блоховские осцилляции около центра начального положения заряда располагаясь на сайтах цепочки, количество которых равно примерно одной максимальной блоховской амплитуде для заданного значения напряжённости электрического поля. Это соответствует тому, что в жёсткой цепочке, при  $\kappa = 0$ , заряд совершает блоховские осцилляции сохраняя свою форму и положение в цепочке, то есть

в конце каждого периода осцилляций заряд возвращается в начальное положение. В деформируемой цепочке, при наличии взаимодействия заряда со смещениями цепочки, при  $\kappa > 0$ , заряд теряет свою первоначальную форму и, совершая блоховские осцилляции, двигается по цепочке по направлению поля, см. [29].

Таким образом, общая скорость движения заряда при колебательном движении заряда убывает с уменьшением константы связи  $\kappa$ , а скорость равномерно движущегося полярона возрастает с уменьшением  $\kappa$ .

Рисунок 3 демонстрирует примеры равномерного движения полярона в цепочках с различными значениями константы связи:  $\kappa = 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4$ . Напряжённость электрического поля  $E = 0.0005$ . Центр начального поляронного состояния вида (7) находится на сайте с номером  $n_0 = 14500$  в цепочке длиной  $N = 15001$  сайт. Начальный полярон вида (7) равномерно двигается по цепочке сохраняя свою форму, поэтому на рисунке 3 представлены графики функций  $Peak(\tilde{t})$ , показывающие положение пика полярона, или номер сайта, на котором находится максимум функции  $|b_n(\tilde{t})|^2$ . При таком режиме движения графики функций  $Peak(\tilde{t})$  практически совпадают с графиками функций  $X(\tilde{t})$ .

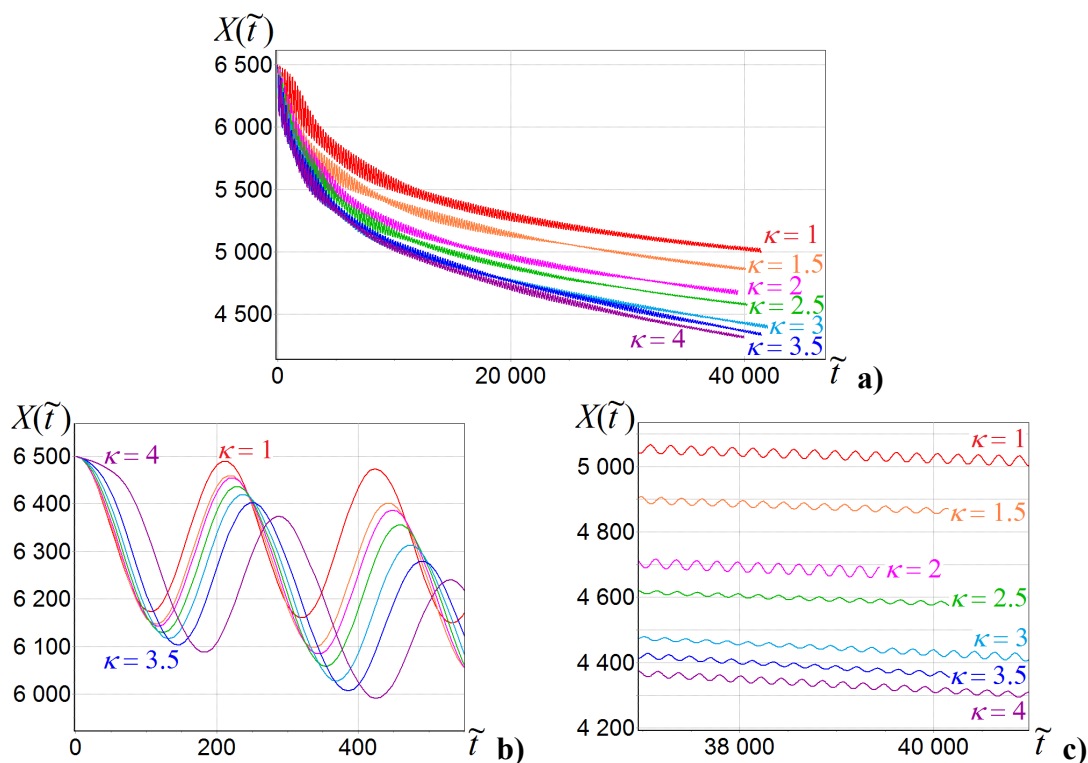


**Рис. 3.** Графики функций  $Peak(\tilde{t})$  для различных значений константы связи  $\kappa = 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4$ . Длина цепочки  $N = 15001$  сайт. Центр начального поляронного состояния вида (7)  $n_0 = 14500$ . Значения параметров цепочки  $\eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$ . Значение напряжённости электрического поля  $E = 0.0005$ .

Представленные на рисунке 3 графики функций  $Peak(\tilde{t})$  наглядно демонстрируют, что скорость равномерного движения полярона по цепочке резко возрастает при уменьшении константы связи  $\kappa$ . Заметим также, что в цепочках с большими значениями константы связи  $\kappa > 4$ , начальный полярон не сдвигается из своего начального положения при заданном значении напряжённости электрического поля  $E = 0.0005$ . На рисунке 2 показано, что при напряжённости электрического поля  $E = 0.03$  начальный полярон не сдвинется в цепочке с  $\kappa \geq 7$ .

Рисунки 4 и 5 иллюстрируют колебательный режим движения заряда в постоянном электрическом поле напряжённостью  $E = 0.03$ . Для значения напряжённости электрического поля  $E = 0.03$  период блоховских осцилляций  $T_{BL} = 2\pi/E \approx 209$ . Максимальная блоховская амплитуда  $A_{BL} = 4\eta/E \approx 320$ . Максимальная скорость заряда в процессе блоховских осцилляций  $V_{BL} = 2\eta \approx 4.8$ . Представленные на рис. 4 и рис. 5 графики функций  $X(\tilde{t})$  и  $|b_n(\tilde{t})|^2$  показывают хорошее соответствие численных и теоретических характеристик блоховских осцилляций.

На рисунке 4 показаны примеры колебательного режима движения заряда в цепочках с теми же значениями константы связи:  $\kappa = 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4$ , что и на рисунке 3. В этом случае заряд теряет свою первоначальную форму и, распределяясь по цепочке, двигается в направлении поля. При значении напряжённости электрического поля  $E =$



**Рис. 4.** Графики функций  $X(\tilde{t})$  для различных значений константы связи  $\kappa = 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4$ . Длина цепочки  $N = 7001$  сайт. Центр начального поляронного состояния вида (7)  $n_0 = 6500$ . Значения параметров цепочки  $\eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$ . Значение напряжённости электрического поля  $E = 0.03$ . На рисунке **b)** графики функций  $X(\tilde{t})$  показаны в начальный период времени, на рисунке **с)** – в конце вычислений.

0.03 равномерного движения в цепочках с указанными значениями константы связи не наблюдается. При таком значении напряжённости электрического поля  $E = 0.03$  заряд может двигаться равномерно в цепочках с константой связи  $\kappa = 5$  и больше (см. рис. 2). Графики функций  $X(\tilde{t})$  на рисунках 4,а и 4,б показывают, что заряд быстро переходит в колебательный режим движения. В цепочке с наибольшим значением константы связи  $\kappa = 4$  заряд с некоторой задержкой переходит в режим осцилляций, заряд оседает и теряет свою форму не мгновенно, это приводит к увеличению периода осцилляций и максимальной амплитуды смещения заряда по сайтам в начальный период времени (см. рис. 4,б). Но со временем, период осцилляций заряда во всех цепочках с выбранными на рисунке 4 значениями константы связи  $\kappa$  близок к теоретическому значению периода блоховских осцилляций для заданного значения напряжённости электрического поля  $E = 0.03 - T_{BL} \approx 209$ .

Теоретические значения основных характеристик блоховских осцилляций не зависят от значения константы связи  $\kappa$ . В дискретных цепочках наблюдаются некоторые отличия максимальной амплитуды и периода осцилляций от соответствующих им теоретических значений при изменении константы связи  $\kappa$ . Этот факт хорошо заметен на рисунке 4,б: в цепочке с константой связи  $\kappa = 1$  период колебаний и максимальная амплитуда колебаний практически точно совпадают с соответствующими характеристиками блоховских осцилляций для заданного значения напряжённости электрического поля. Таким образом можно заметить, что чем меньше значение константы связи в цепочке, тем ближе характеристики осцилляций заряда к соответствующим характеристикам блоховских осцилляций.

В примерах на рисунке 4 мы наблюдаем осцилляции заряда в различных цепочках.



Поэтому можно рассматривать мгновенную скорость заряда и среднюю, или общую скорость. Максимальная мгновенная скорость заряда во всех цепочках на рисунке 4,b практически точно совпадает с теоретическим значением максимальной скорости заряда в процессе блоховских осцилляций  $V_{BL} = 2\eta \approx 4.8$ .

На рисунке 4,c графики функций  $X(\tilde{t})$  показаны в конце периода вычислений. Очевидно, что значение  $X(\tilde{t})$  не равно сайту, до которого дошёл заряд в цепочке, так как функция  $X(\tilde{t})$  описывает положение центра масс заряда. Во всех показанных на рисунке 4,c примерах заряды не дошли до конца цепочек, поскольку все графики функций  $X(\tilde{t})$  демонстрируют одинаковый период осцилляций, близкий к блоховскому периоду осцилляций. Если бы заряд дошел до края цепочки, то осцилляции быстро бы нарушились, сразу бы начал уменьшаться и совсем исчезать период колебаний. Таким образом, в примерах на рисунке 4 показано, что заряд движется по цепочке в направлении поля, совершая блоховские осцилляции. В цепочках с большими значениями константы связи заряд уходит на большее расстояние. Средняя скорость заряда в процессе движения уменьшается, в конце показанного периода вычислений на рисунке 4,c средняя скорость заряда во всех цепочках почти одинакова и, очевидно, что далее будет приближаться к нулю.

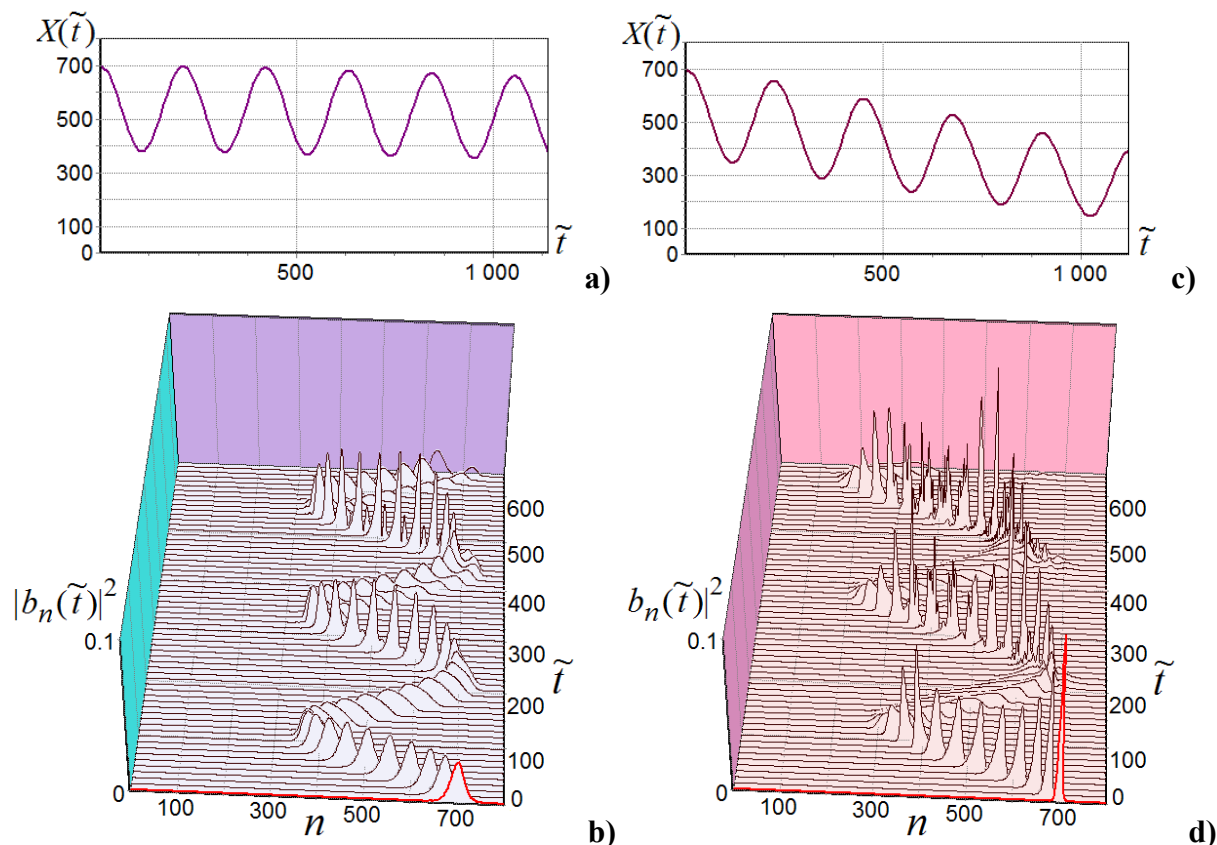
На рисунке 5 показаны два примера колебательного режима движения заряда в начальный период времени в цепочках с различными значениями константы связи. На рисунках 5,a и 5,b выбрана цепочка с константой связи  $\kappa = 0.5$ , на рисунках 5,c и 5,d константа связи в цепочке  $\kappa = 2$ . Значение напряжённости электрического поля такое же, как и в предыдущем примере:  $E = 0.03$ . Центр начального поляронного состояния вида (7) находится на сайте с номером  $n_0 = 700$  в цепочке длиной  $N = 801$  сайт.

В цепочке с константой связи  $\kappa = 0.5$  (см. рис. 5,b) начальное поляронное состояние вида (7) значительно шире начального поляронного состояния в цепочке с константой связи  $\kappa = 2$  (см. рис. 5,d). В цепочке с константой связи  $\kappa = 2$  заряд быстро теряет свою первоначальную форму, при этом период осцилляций заряда и максимальная амплитуда осцилляций достаточно близки к соответствующим характеристикам блоховских осцилляций.

В цепочке с маленьким значением константы связи  $\kappa = 0.5$  (рис. 5,a и 5,b), широкое начальное поляронное состояние движется по цепочке сохраняя свою форму в течение первого периода осцилляций, затем заряд постепенно теряет первоначальную форму и, распределяясь по цепочке движется в среднем по направлению поля, совершая блоховские осцилляции. В этом случае период осцилляций заряда и максимальная амплитуда осцилляций практически совпадают с теоретическими значениями периода блоховских осцилляций и максимальной блоховской амплитуды для заданного значения напряжённости электрического поля  $E = 0.03$ :  $T_{BL} = 2\pi/E \approx 209$ ,  $A_{BL} = 4\eta/E \approx 320$ . При  $\kappa \rightarrow 0$  заряд, сохраняя свою первоначальную форму, совершает блоховские осцилляции около начального положения заряда. При этом графики функций  $X(\tilde{t})$  и  $|b_n(\tilde{t})|^2$ , в течение большого количества осцилляций, похожи на соответствующие графики в течение первого блоховского периода, показанного на рисунках 5,a и 5,b, то есть, после каждого периода осцилляций заряд возвращается в начальное положение.

Максимальная мгновенная скорость заряда в примерах на рисунке 5 практически одинаковая и равна максимальной скорости заряда в процессе блоховских осцилляций  $V_{BL} = 2\eta \approx 4.8$ . Средняя скорость заряда в начальный период времени значительно выше в цепочке с большим значением константы связи  $\kappa = 2$  (см. рис. 5,a и 5,c). Напомним, что при равномерном движении заряда скорость выше в цепочках с меньшими значениями константы связи  $\kappa$ .





**Рис. 5.** Графики функций  $X(\tilde{t})$  и  $|b_n(\tilde{t})|^2$  в процессе колебательного режима движения заряда по цепочкам с различными значениями константы связи. На рисунках **a)** и **b)**  $\kappa = 0.5$ , на рисунках **c)** и **d)**  $\kappa = 2$ . Длина цепочки  $N = 801$  сайт. Центр начального поляронного состояния вида (7) –  $n_0 = 700$ . Значения параметров цепочки  $\eta = 2.4$ ,  $\omega = 1$ ,  $\omega' = 1$ . Значение напряжённости электрического поля  $E = 0.03$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе было проведено исследование различных режимов движения заряда в постоянном электрическом поле в полинуклеотидных цепочках с различными значениями константы связи  $\kappa$ . Значения следующих параметров цепочек: матричные элементы перехода по сайтам  $\eta = 2.4$ , частота колебаний сайтов  $\omega = 1$ , коэффициент трения  $\omega' = 1$ , не изменялись во всех показанных примерах.

В процессе режима равномерного движения заряд движется по цепочке с постоянной скоростью сохраняя свою форму, следовательно, по цепочке движется полярон. Проведённые вычисления показали, что скорость равномерного движения полярона по цепочке резко возрастает при уменьшении константы связи  $\kappa$ , то есть более ”широкие” (см. рис. 1) поляроны двигаются быстрее.

Показано, что при фиксированном значении напряжённости электрического поля  $E$ , достаточно узкий полярон не сдвигается из своего начального положения, или, другими словами, при заданном значении напряжённости электрического поля  $E$ , можно выбрать цепочку с таким (достаточно большим) значением константы связи  $\kappa$ , в которой начальный полярон останется неподвижным (см. рис. 2 и рис. 3).

Так как характер движения и распределения заряда по цепочке в процессе колебательного режима движения совершенно непохож на равномерное движение полярона, то и зависимость характера движения осциллирующего заряда от константы связи  $\kappa$  совершенно иная. При колебательном режиме движения заряд теряет свою

первоначальную форму и, распределяясь по цепочке, движется в направлении поля совершая блоховские осцилляции. Показано, что общая скорость движения заряда при колебательном движении заряда убывает с уменьшением константы связи  $\kappa$ , на большее расстояние продвигается заряд в цепочке с большим значением константы связи  $\kappa$ . Показано также, что максимальная мгновенная скорость заряда в цепочках с различными значениями константы связи  $\kappa$  практически одинаковая и равна максимальной скорости заряда в процессе блоховских осцилляций  $V_{BL} = 2\eta$ .

Выбранные значения параметров цепочек:  $\eta = 2.4$ ,  $\omega = 1$ ,  $\omega' = 1$ , являются модельными, при таких параметрах можно значительно быстрее провести численное моделирование. *PolyA/PolyT* цепочке ДНК соответствуют следующие безразмерные значения параметров цепочки:  $\kappa = 4$ ,  $\eta = 2.4$ ,  $\omega = 0.01$ ,  $\omega' = 0.006$ . При таких параметрах требуется значительно больше времени для проведения расчётов. Но зависимость характера движения заряда от значения константы связи  $\kappa$  в цепочках с параметрами ДНК цепочек, аналогична соответствующей зависимости в рассмотренных модельных примерах. В примерах на рисунках 2, 4 и 5 было рассмотрено движение заряда в поле с безразмерной напряжённостью  $E = 0.03$ . В размерных единицах указанное значение напряжённости электрического поля примерно равно величине  $\mathcal{E} \approx E \cdot 1.88 \cdot 10^6 \text{ В/см} \approx 5.64 \cdot 10^4 \text{ В/см}$ . Предварительные расчёты показывают, что при маленьких значениях параметров  $\omega = 0.01$ ,  $\omega' = 0.006$ , которые соответствуют параметрам цепочки ДНК, для проведения аналогичных исследований нужно задавать существенно меньшие значения напряжённости электрического поля. В размерных единицах значение напряжённости электрического поля  $\mathcal{E}$  нужно задавать порядка  $\mathcal{E} \approx 5 \cdot 10^3 \text{ В/см}$  и меньше. При уменьшении значения напряжённости электрического поля скорость равномерного движения полярона уменьшается, амплитуда и период блоховских осцилляций увеличиваются, и, как следствие, существенно увеличиваются затраты на проведение вычислительных экспериментов.

В дальнейшем мы планируем провести аналогичные исследования для цепочек с параметрами ДНК и оценить в физических величинах скорость заряда и напряжённость электрического поля при различных режимах движения.

Работа выполнена с использованием вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСЦ РАН).

Работа поддержана грантом РФФИ №19-07-00406.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chetverikov A.P., Ebeling W., Lakhno V.D., Velarde M.G. Discrete-breather-assisted charge transport along DNA-like molecular wires. *Phys. Rev. E*. 2019. V. 100. P. 052203. doi: [10.1103/PhysRevE.100.052203](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.052203)
2. Taniguchi M., Kawai T. DNA electronics. *Physica E*. 2006. V. 33. P. 1–12. doi: [10.1016/j.physe.2006.01.005](https://doi.org/10.1016/j.physe.2006.01.005)
3. 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. No. 29. P. 4331–4357. doi: [10.1142/S0217979205032802](https://doi.org/10.1142/S0217979205032802)
4. Astakhova T.Yu., Vinogradov G.A. Polarons on Dimerized Lattice of Polyacetylene. Continuum Approximation *Mathematical Biology and Bioinformatics*. 2021. V. 16. №2. P. 335–348. doi: [10.17537/2021.16.335](https://doi.org/10.17537/2021.16.335)
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](https://doi.org/10.1038/35001029)
6. Kasumov A.Y., Kociak M., Guéron S., Reulet B., Volkov V.T., Klinov D.V., Bouchiat H.

- Proximity-Induced Superconductivity in DNA. *Science*. 2001. V. 291. No. 5502. P. 280–282. doi: [10.1126/science.291.5502.280](https://doi.org/10.1126/science.291.5502.280)
7. Lakhno V.D. DNA nanobioelectronics. *Int. Quantum. Chem.* 2008. V. 108. P. 1970–1981. doi: [10.1002/qua.21717](https://doi.org/10.1002/qua.21717)
  8. Porath D., Cuniberti G., Di Felice R. Charge transport in DNA-based devices. *Top. Curr. Chem.* 2004. V. 237. P. 183–227. doi: [10.1007/b94477](https://doi.org/10.1007/b94477)
  9. Eudres R.G., Cox D.L., Singh R.R.P. Colloquium: The quest for high-conductance DNA. *Rev. Mod. Phys.* 2004. V. 76. P. 195–214. doi: [10.1103/RevModPhys.76.195](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.76.195)
  10. Fialko N.S., Lakhno V.D. Dynamics of Large Radius Polaron in a Model Polynucleotide Chain with Random Perturbations. *Math. Biol. Bioinf.* 2019. V. 14. №2. P. 406–419. doi: [10.17537/2019.14.406](https://doi.org/10.17537/2019.14.406)
  11. Fuentes M.A., Maniadis P., Kalosakas G., Rasmussen K.O., Bishop A.R., Kenkre V.M., Gaididei Yu.B. Multipeaked polarons in soft potentials. *Phys. Rev. E*. 2004. V. 70. P. 025601(R). doi: [10.1103/PhysRevE.70.025601](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.70.025601)
  12. Hennig D., Burbanks A.D., Osbaldestin A.H. Directed current in the Holstein system. *Phys. Rev. E*. 2011. V. 83. P. 031121. doi: [10.1103/PhysRevE.83.031121](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.83.031121)
  13. Yakushevich L.V., Balashova V.N., Zakiryanov F.K. On the DNA Kink Motion Under the Action of Constant Torque. *Math. Biol. Bioinf.* 2016. V. 11. №1. P. 81–90. doi: [10.17537/2016.11.81](https://doi.org/10.17537/2016.11.81)
  14. Lakhno V.D. Davydov’s solitons in a homogeneous nucleotide chain. *Int. J. Quant. Chem.* 2010. V. 110. P. 127–137. doi: [10.1002/qua.22264](https://doi.org/10.1002/qua.22264)
  15. Коршунова А.Н., Лахно В.Д. Особенности движения полярона в молекулярных полинуклеотидных цепочках конечной длины при наличии в цепочке локализованных возбуждений. *Математическая биология и биоинформатика*. 2017. Т. 12. №1. С. 204–223. doi: [10.17537/2017.12.204](https://doi.org/10.17537/2017.12.204)
  16. Conwell E.M., Rakhmanova S.V. Polarons in DNA. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2000. V. 97. P. 4556–4560. doi: [10.1073/pnas.050074497](https://doi.org/10.1073/pnas.050074497)
  17. Lakhno V.D. Soliton-like Solutions and Electron Transfer in DNA. *J. Biol. Phys.* 2000. V. 26. P. 133–147. doi: [10.1023/A:1005275211233](https://doi.org/10.1023/A:1005275211233)
  18. Korshunova A.N., Lakhno V.D. A new type of localized fast moving electronic excitations in molecular chains. *Physica E*. 2014. V. 60. P. 206–209. doi: [10.1016/j.physe.2014.02.025](https://doi.org/10.1016/j.physe.2014.02.025)
  19. Zhongkai Huang, Masayuki Hoshina, Hajime Ishihara, Yang Zhao. Transient dynamics of super Bloch oscillations of a one dimensional Holstein polaron under the influence of an external AC electric field. *Annalen der Physik*. 2017. V. 529. P. 1600367. doi: [10.1002/andp.201600367](https://doi.org/10.1002/andp.201600367)
  20. De Pablo P.J., Moreno-Herrero F., Colchero J., Gómez Herrero J., Herrero P., Baró A.M., Ordejón P., Soler J.M., Artacho E. Absence of dc-Conductivity in  $\lambda$ -DNA. *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 85. P. 4992–4995. doi: [10.1103/PhysRevLett.85.4992](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.85.4992)
  21. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Bloch oscillations of a soliton in a molecular chain. *Eur. Phys. J. B*. 2007. V. 55. P. 85–87. doi: [10.1140/epjb/e2007-00045-3](https://doi.org/10.1140/epjb/e2007-00045-3)
  22. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Electron motion in a Holstein molecular chain in an electric field. *Euro. Phys. J. B*. 2011. V. 79. P. 147–151. doi: [10.1140/epjb/e2010-10565-2](https://doi.org/10.1140/epjb/e2010-10565-2)
  23. Nikolaos K. Voulgarakis. The effect of thermal fluctuations on Holstein polaron dynamics in electric Field. *Physica B*. 2017 V. 519. P. 15–20. doi: [10.1016/j.physb.2017.04.030](https://doi.org/10.1016/j.physb.2017.04.030)
  24. Коршунова А.Н., Лахно В.Д. Поляронный перенос заряда в однородной Poly G/ Poly C цепочке в модели Пейрарда-Бишопа-Холстейна в постоянном электрическом поле. *Журнал технической физики*. 2020. Т. 90. №9. 1528–1536. doi: [10.21883/JTF.2020.09.49686.397-19](https://doi.org/10.21883/JTF.2020.09.49686.397-19)
  25. Astakhova T., Vinogradov G. New aspects of polaron dynamics in electric field. *Eur. Phys.*

- J. B.* 2019. V. 92. P. 247. doi: [10.1140/epjb/e2019-100339-y](https://doi.org/10.1140/epjb/e2019-100339-y)
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](https://doi.org/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](https://doi.org/10.1016/0003-4916(59)90003-X)
28. Коршунова А.Н., Лахно В.Д. Моделирование стационарных и нестационарных режимов движения заряда в однородной холстейновской цепочке в постоянном электрическом поле. *Журнал технической физики.* 2018. Т. 88. №9. С. 1312–1319. doi: [10.21883/JTF.2018.09.46414.14-18](https://doi.org/10.21883/JTF.2018.09.46414.14-18)
29. Лахно В.Д., Фиалко Н.С. Блоховские осцилляции в однородных нуклеотидных фрагментах. *Письма в ЖЭТФ.* 2004. Т. 79. №10. С. 575–578.

Рукопись поступила в редакцию 01.10.2021.

Переработанный вариант поступил 27.12.2021.

Дата опубликования 07.01.2022.

===== TRANSLATIONS OF PUBLISHED ARTICLES =====

## **Charge Motion along Polynucleotide Chains in a Constant Electric Field Depends on the Charge Coupling Constant with Chain Displacements**

**Korshunova A.N., Lakhno V.D.**

*Institute of Mathematical Problems of Biology RAS - the Branch of Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS*

**Abstract.** Various regimes of a charge motion along a chain in a constant electric field are investigated. This motion is simulated on the basis of the Holstein model. Earlier studies demonstrate a possibility of a uniform motion of a charge in a constant electric field over very long distances. For small values of the electric field intensity a Holstein polaron can move at a constant velocity. As the electric field intensity increases, a charge motion acquires oscillatory character, performing Bloch oscillations. Since the charge motion depends on the whole set of the system parameters the character of the motion depends not only on the value of the electric field intensity. Therefore, the electric field intensity for which the uniform motion takes place differs for chains with different parameters. The character of the charge motion and distribution is considered in chains with different values of the constant of coupling between the charge and the displacements of the chain. We showed that the values of the electric field intensity for which the regime of a charge motion changes are different in chains with different values of the coupling constant. We also demonstrated that for one and the same value of the electric field intensity, in chains with different values of the coupling constant either a uniform motion or an oscillatory motion, or a stationary polaron can be observed.

**Key words:** *nanobioelectronics, nanowires, molecular chains, polarons, DNA, charge transfer, Holstein model.*