

Замечание о формировании поляронных состояний в однородных цепочках

Лахно В.Д.* , Фиалко Н.С.**

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

Аннотация. В современной литературе при моделировании распространения заряда в биополимерах, например, в ДНК, рассматриваются разные варианты граничных условий – свободные концы или замыкание в кольцо. При этом подразумевается, что для длинных цепочек края практически не влияют на динамику заряда, и в большинстве случаев это справедливо. В данной заметке обсуждается случай, когда эти краевые условия приводят к существенно разным результатам.

Ключевые слова: полярон Холстейна, цепочка со свободными концами, периодические граничные условия.

При моделировании динамики заряженной частицы в дискретных одномерных цепочках возникает вопрос краевых эффектов. Во многих работах для описания краевых условий применяется замыкание цепочки в кольцо (см., например, [1–11]), и предполагается, что такое представление эквивалентно очень длинной (бесконечной) цепочке со свободными концами.

В работах [12, 13] было показано, что в однородной деформируемой полинуклеотидной цепочке со свободными концами заряд, в нулевой момент времени равномерно распределенный по цепочке с энергией, соответствующей дну ее зоны проводимости, формирует поляронное состояние даже в отсутствие в такой системе диссипации. Увеличение длины цепочки не меняет картины качественно: меняется только время формирования локализованных состояний в цепочке со свободными концами.

Численный эксперимент показывает, что для той же цепочки, свернутой в кольцо (периодические граничные условия), этого не происходит, т.е. заряд остается в делокализованном состоянии. Это простая, но наглядная демонстрация трансляционной симметрии в случае однородного кольца: при любых начальных деформациях, одинаковых на всех сайтах цепочки, заряд остается в делокализованном состоянии.

В то же время, если внести в закольцованную цепочку малое возмущение, нарушающее симметрию, то формирование поляронного состояния становится возможным (см. рис. 1). Например, если ввести в закольцованную цепочку кратковременное возмущение, нарушающее трансляционную инвариантность цепочки, но не меняющее энергию системы, то это приведет к образованию полярона и его движению по цепочке, восстанавливающему трансляционную инвариантность цепочки. Таким образом, формирование полярона в цепочке со свободными концами обусловлено тем, что ее концы являются для цепочки дефектом, нарушающим ее однородность.

Включение в рассмотрение температуры T меняет ситуацию. В этом случае полярон формируется как в цепочке со свободными концами, так и в закольцованной цепочке,

*lak@impb.ru

**fialka@impb.ru

поскольку температурные флуктуации делают ее неоднородной при сколь угодно малых значениях T .

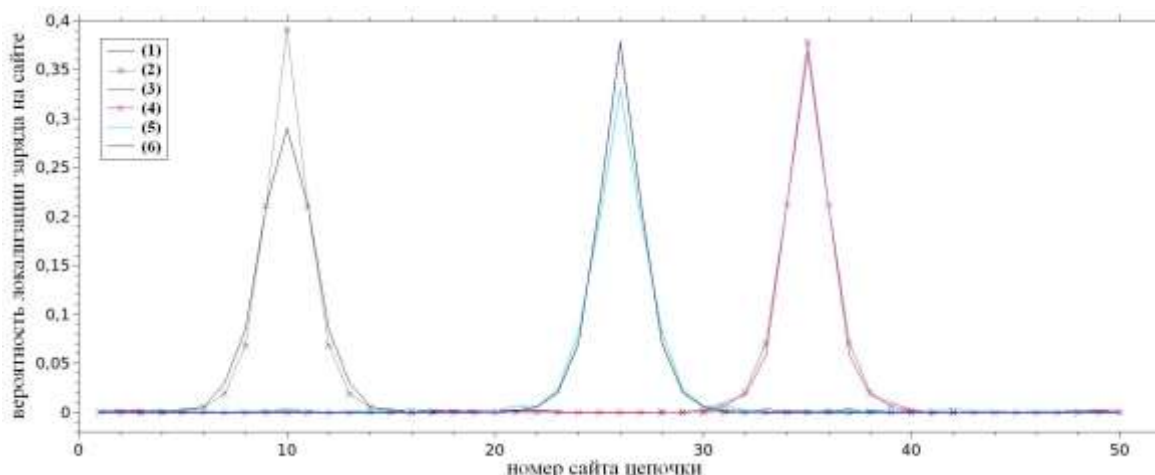


Рис. 1. Распределение вероятностей локализации заряда в цепочке длиной 50 сайтов на больших расчетных временах. Параметры взяты из [12, п.7]. Графики (1)–(4) рассчитаны для закольцованной цепочки с дефектом: (1) – результат для «ямки» на 10 сайте в системе без трения, (2) – то же в системе с трением; (3) – результат для «бугорка» на 10 сайте в системе без трения, (4) – то же в системе с трением. При этом полярон локализуется в самой удаленной по кольцу от 10 сайта области 35 сайта. Для сравнения приведены результаты для такой же цепочки со свободными концами [12, п.7]: (5) без трения и (6) – с трением.

Отметим, что, согласно работе [14], стремление сделать цепочку бездефектной путем устремления ее длины к бесконечности делает образование в ней полярона невозможным при любом конечном значении температуры. Такая же ситуация будет наблюдаться и в закольцованной цепочке, если устремить ее длину к бесконечности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kalosakas G. Multi-peaked localized states of DNLS in one and two dimensions. *Physica D*. 2006. V. 216. P. 44–61. doi: [10.1016/j.physd.2005.12.023](https://doi.org/10.1016/j.physd.2005.12.023)
2. 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. doi: [10.1103/PhysRevB.78.134303](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.134303)
3. Luo B., Ye J., Guan C, Zhao Y. Validity of time-dependent trial states for the Holstein polaron. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2010. V. 12. P. 15073–15084. doi: [10.1039/c0cp00663g](https://doi.org/10.1039/c0cp00663g)
4. Cantu Ros O.G., Cruzeiro L., Velarde M.G., Ebeling W. On the possibility of electric transport mediated by long living intrinsic localized soliton modes. *Eur. Phys. J. B*. 2011. V. 80. P 545–554. doi: [10.1140/epjb/e2011-10880-0](https://doi.org/10.1140/epjb/e2011-10880-0)
5. Chen L., Zhao Y., Tanimura Y. Dynamics of a one-dimensional holstein polaron with the hierarchical equations of motion approach. *J. Phys. Chem. Lett.* 2015. V. 6. No. 15. P. 3110–3115. doi: [10.1021/acs.jpcclett.5b01368](https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.5b01368)
6. Cisneros-Ake L.A., Cruzeiro L., Velarde M.G. Mobile localized solutions for an electron in lattices with dispersive and non-dispersive phonons. *Physica D*. 2015. V. 306. P. 82–93. doi: [10.1016/j.physd.2015.05.008](https://doi.org/10.1016/j.physd.2015.05.008)
7. Tabi C.B., Koko A.D., Doko R.O., Ekobena Fouda H.P., Kofané T.C. Modulated charge patterns and noise effect in a twisted DNA model with solvent interaction. *Physica A*. 2016. V. 442. P. 498–509. doi: [10.1016/j.physa.2015.09.011](https://doi.org/10.1016/j.physa.2015.09.011)

8. Velarde M.G. Nonlinear dynamics and the nano-mechanical control of electrons in crystalline solids. Nano-mechanical control of electrons. *Eur. Phys. J. Special Topics*. 2016. V. 225. P. 921–941. doi: [10.1140/epjst/e2016-02647-2](https://doi.org/10.1140/epjst/e2016-02647-2)
9. Voulgarakis N.K. The effect of thermal fluctuations on Holstein polaron dynamics in electric field. *Physica B: Cond. Matt.* 2017. V. 519. P. 15–20. doi: [10.1016/j.physb.2017.04.030](https://doi.org/10.1016/j.physb.2017.04.030)
10. Madiba S.E., Tabi C.B., Ekobena H.P.F., Kofané T.C. Long-range energy modes in alpha-helix lattices with inter-spine coupling. *Physica A*. 2019. V. 514. P. 298–310. doi: [10.1016/j.physa.2018.09.019](https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.09.019)
11. Huang Z., Hoshina M, Ishihara H., Zhao Y. transient dynamics of super Bloch oscillations of a 1D Holstein polaron under the influence of an external AC electric field. *Ann. Phys. (Berlin)*. 2019. V. 531. P. 1800303 doi: [10.1002/andp.201800303](https://doi.org/10.1002/andp.201800303)
12. Лахно В.Д., Коршунова А.Н. Формирование стационарных электронных состояний в однородных молекулярных цепочках конечной длины. *Мат. биол. и биоинф.* 2010. Т. 5. № 1. С. 1–29. doi: [10.17537/2010.5.1](https://doi.org/10.17537/2010.5.1)
13. Лахно В.Д., Коршунова А.Н. Моделирование образования самозахваченного состояния в полинуклеотидной цепочке. *Нелинейная динамика*. 2008. Т. 4. № 2. С. 193–214. URL: <http://www.mathnet.ru/links/949413381e5594b92430bd68688a2784/nd232.pdf> (дата обращения: 28.07.2022).
14. Lakhno, V.D., Fialko, N.S. On the dynamics of a polaron in a classical chain with finite temperature. *J. Exp. Theor. Phys.* 2015. V. 120. P. 125–131. doi: [10.1134/S106377611501015X](https://doi.org/10.1134/S106377611501015X)

Рукопись поступила в редакцию 22.07.2022.

Дата опубликования 30.07.2022.

===== SHORT COMMUNICATION =====

A note on the formation of polaron states in a homogeneous chain

Lakhno V.D., Fialko N.S.

Institute of Mathematical Problems of Biology RAS - the Branch of Keldysh Institute of Applied Mathematics of Russian Academy of Sciences, Pushchino, Russia

Abstract. Today in many articles charge propagation in biopolymers, for example, in DNA, have been modeled with different variants of boundary conditions – free ends or ring. It is assumed that for long chains, the ends practically do not affect the charge dynamics, and this is true in most cases. In this note, we discuss the case when these boundary conditions lead to significantly different results.

Key words: *Holstein polaron, chain with free ends, periodic boundary conditions.*