14.1

Моделирование стационарных и нестационарных режимов движения заряда в однородной холстейновской цепочке в постоянном электрическом поле

© А.Н. Коршунова, В.Д. Лахно

Институт математических проблем биологии РАН — филиал Федерального исследовательского центра „Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН",
Пущино, Московская область, Россия
e-mail: alya@impb.ru

(Поступило в Редакцию 13 января 2018 г.)

Проведено численное моделирование движения заряда в холстейновской молекулярной цепочке в постоянном электрическом поле. Показано, что при выбранных параметрах цепочки существует возможность равномерного движения заряда в постоянном электрическом поле на очень большие расстояния, на сотни тысяч сайтов. 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. Показано хорошее соответствие теоретической и численной зависимостей скорости движения заряда с постоянной скоростью от напряженности электрического поля.

DOI: 10.21883/0000000000

Введение

Изучение движения зарядов в одномерных молекулярных цепочках является проблемой, актуальность которой 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. Вопрос о возможности переноса энергии и заряда локализованными возбуждениями — солитонами и поляронами — в таких биологических молекулах, как белки, был поставлен Давыдовым [1–4]. В связи с развитием молекулярной нанобиоэлектроники, основной задачей которой является конструирование электронных устройств на основе биологических молекул [5,6], все больший интерес вызывают проблемы транспорта заряда в таких протяженных молекулах как ДНК [7–15].

В настоящей работе приведены результаты численного моделирования движения заряда в полинуклеотидной холстейновской молекулярной цепочке в постоянном электрическом поле. Ранее в работе [16] этот вопрос был рассмотрен одним из авторов в случае, когда цепочка считалась непрерывной. Очевидно, полученные в [16] результаты могут быть непригодны в случае дискретной цепочки. Более того, в дискретном случае могут реализовываться такие режимы движения, которые отсутствуют в непрерывном случае.

Динамическая модель дискретной холстейновской цепочки

В используемой ниже модели полинуклеотидная цепочка рассматривается состоящей из N-сайтов. Каждый сайт представляет нуклеотидную пару, которая рассматривается как гармонический осциллятор [17]. Для моделирования квантовой динамики частицы в цепочке из N-нуклеотидных пар будем исходить из гамильтониана Холстейна, впервые рассмотревшего цепочку, каждый сайт которой представляет двухатомную молекулу [17,18]:

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

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.

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

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

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

где b_n — амплитуда вероятности нахождения заряда на n-м сайте, $\sum\limits_n |b_n|^2 = 1$. В классические уравнения движения (3) введена диссипация, определяемая коэффициентом трения γ.

Уравнения (2) являются уравнениями Шредингера для амплитуд вероятности b_n, описывающими эволюцию частицы в деформируемой цепочке, где $\hbar = h/2\pi$, h — постоянная Планка, а уравнение (3) представляет классическое уравнение движения, описывающее динамику нуклеотидных пар с учетом диссипации.

Перейдем в уравнениях (2), (3) к безразмерным переменным с помощью соотношений

$$\eta = \tau\nu/\hbar, \quad \omega^2 = \tau^2 K/M,$$
$$\omega' = \tau\gamma/M, \;\; q_n = \beta u_n, \;\; E = \mathscr{E} e a \tau / \hbar,$$
$$\varkappa\omega^2 = \tau^3(\alpha)^2/M\hbar, \;\; \beta = \tau^2\alpha/M, \;\; t = \tau\tilde{t}, \qquad (4)$$

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

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

$$i\,\frac{db_n}{d\tilde{t}} = -\eta\big(b_{n+1} + b_{n-1}\big) + \varkappa\omega^2 u_n b_n + Enb_n,$$
$$\frac{d^2u_n}{d\tilde{t}^2} = -\omega_n'\,\frac{du_n}{d\tilde{t}} - \omega_n^2 u_n - |b_n|^2. \qquad (5)$$

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

Моделирование равномерного движения заряда в постоянном электрическом поле

Очевидно, что моделирование динамики частицы даже в однородной $(G)_n$ цепочке является задачей многопараметрической, что сразу же приводит к необходимости большого количества расчетов для различных значений параметров цепочки. Подбор параметров системы для моделирования конкретного режима поведения заряда в электрическом поле осуществляется как в соответствии с полученными результатами аналитического исследования системы в континуальном пределе [19], так и в результате проведенных численных исследований. Выбирая модельные параметры цепочек, мы можем исследовать движение заряда, характер распределения заряда со значительно большей вычислительной скоростью, чем для реальных ДНК цепочек.

Для моделирования движения заряда в электрическом поле были выбраны следующие значения безразмерных параметров: $\varkappa = 1$, $\eta = 1.276$, $\omega = 1$. Для выбранных значений параметров варьируем значения трения в цепочке ω' и значения напряженности электрического поля E. Вычисления выполнялись стандартным методом Рунге–Кутта четвертого порядка. Для моделирования равномерного движения заряда в электрическом поле мы поместили в цепочку в начальный момент времени заряд, соответствующий стационарному решению уравнений (2), (3) в отсутствие внешнего поля, а именно начальные значения $|b_n(0)|$ были выбраны в виде обратного гиперболического косинуса

$$|b_n(0)| = \frac{\sqrt{2}}{4}\sqrt{\frac{\varkappa}{|\eta|}}\,\mathrm{ch}^{-1}\left(\frac{\varkappa(n-n_0)}{4|\eta|}\right), \qquad (6)$$

$u_n^0 = |\,b_n(0)|^2/\omega_n^2$, $du_n^0/d\tilde{t} = 0$.

Определим характерный размер распределения заряда в цепочке как

$$d(\tilde{t}) = \sum |b_n(\tilde{t})|^2 \Big/ \sum |b_n(\tilde{t})|^4 = 1 \Big/ \sum |b_n(\tilde{t})|^4. \quad (7)$$

При выбранных значениях параметров цепочки характерный размер полярона в цепочке определяется выражением $\lim_{\tilde{t}\to\infty} d(\tilde{t}) \approx 15$. А именно при таких параметрах цепочки полярон широкий, располагается на достаточно большом количестве сайтов. Значение n_0 (центр начального распределения заряда) в (6) выбиралось 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. Поле включается „мгновенно“ в начальный момент времени.

Вполне закономерно возникает вопрос, при каких значениях напряженности электрического поля E существует возможность равномерного движения заряда в цепочке для выбранных значений параметров. В работе [19] подробно рассмотрен вопрос о соотношении между равновесной скоростью полярона $V = va/\tau$ и напряженностью электрического поля в континуальном пределе. Для недемпфированного движения нуклеотидных пар, когда трение не слишком велико $\omega > \omega'/2$, в [19] получено следующее соотношение между равновесной скоростью полярона V и напряженностью электрического поля E:

$$E = \varkappa\omega^2\omega' V I, \quad E = \mathscr{E}\,\frac{ea\tau}{\hbar},$$
$$I = \frac{2\eta}{\varkappa V^4}\int_0^\infty \frac{x^4/\,\mathrm{sh}^2 x}{(x^2+c_1)+c_2^2}\,dx,$$
$$c_1 = \left(\frac{2\pi\eta}{\varkappa V}\right)^2\left(\frac{\omega'^2}{2} - \omega^2\right),$$
$$c_2^2 = \left(\frac{2\pi\eta}{\varkappa V}\right)^4 \omega'^2\left(\omega^2 - \left(\frac{\omega'}{2}\right)^2\right). \qquad (8)$$

В случае демпфированного движения нуклеотидных пар (для $\omega'/2 > \omega$) величина I, согласно [19], определяется соотношением

$$I = \frac{2\eta}{\varkappa V^4}\int_0^\infty \frac{x^4/\,\mathrm{sh}^2 x}{(x^2+c_1^2)(x^2+c_2^2)}\,dx,$$
$$c_1 = \frac{2\pi\eta}{\varkappa V}\left(\frac{\omega'}{2} - \sqrt{\left(\frac{\omega'}{2}\right)^2 - \omega^2}\right),$$
$$c_2 = \frac{2\pi\eta}{\varkappa V}\left(\frac{\omega'^2}{2} + \sqrt{\left(\frac{\omega'}{2}\right)^2 - \omega^2}\right). \qquad (9)$$

Предельный случай, когда трение отсутствует, был рассмотрен в работе [20]. В настоящей работе мы рассмотрим зависимость скорости полярона V от напряженности электрического поля E для различных значений трения ω'.

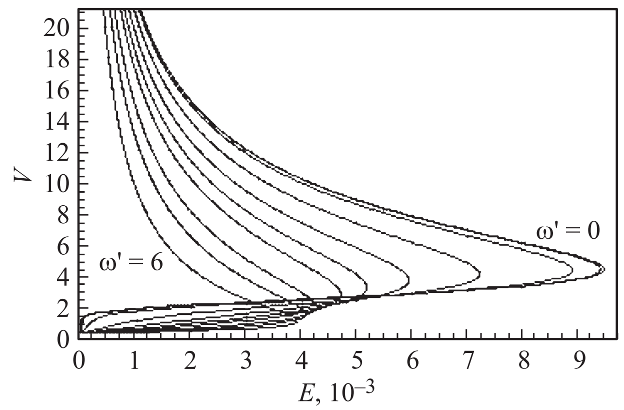

Рис. 1. Зависимость скорости полярона V от напряженности электрического поля E при $\varkappa = 1$ для различных значений параметра ω' ($\omega' = 6, 4, 3, 2, 1.5, 1, 0.5, 0.1, 0.01, 0$); $\eta = 1.276$, $\omega = 1$.

На рис. 1 приведены зависимости скорости солитона от напряженности электрического поля E для различных значений параметра ω' при $\varkappa = 1$, определяемые (8), (9).

Четыре левые кривые, представленные на рис. 1, соответствуют демпфированному движению нуклеотидных пар (9): $\omega'/2 > \omega$, а именно $\omega' = 6$, 4, 3, 2. Следующие пять кривых соответствуют недемпфированному движению нуклеотидных пар (8): $\omega'/2 < \omega$, $\omega' = 1.5$, 1, 0.5, 0.1, 0.01. Рассмотренный в [20] предельный случай $\omega' = 0$ соответствует крайней правой кривой на рис. 1, а предельному случаю $\omega' = \infty$ соответствует ось ординат. Согласно рис. 1, равномерное движение солитона возможно только в интервале $0 < E < E_{\max}(\omega')$. На каждой кривой ветвь, для которой $dV/dE = V'_E > 0$, соответствует устойчивому движению солитона, а ветвь с $V'_E < 0$ — неустойчивому движению. Из (8), (9) следует, что наличие в системе трения приводит к появлению омического участка, т. е. линейной зависимости $V(E)$ при малых E на устойчивых ветвях кривых $V(E)$.

На рис. 2 показаны графики функции

$$X(\tilde{t}) = \sum_n |b_n(\tilde{t})|^2 n, \qquad (10)$$

описывающие движение центра масс частицы. Представленные графики демонстрируют линейную зависимость от $\tilde{t}$ почти для всех значений напряженности электрического поля E (рис. 2). Хорошо видно, что самый левый график функции $X(\tilde{t})$ для $E = 0.0012$ ($\mathscr{E} = 2.256 \cdot 10^3$ V/cm) на рис. 2 заметно отклоняется от прямой линии, это означает, что заряд переходит в колебательный режим движения. Таким образом, показано, что для значений поля $E > 0.0011$ при выбранных параметрах цепочки, равномерного движения заряда не существует.

На рис. 3 показаны графики функций $|b_n(\tilde{t})|$ и $X(\tilde{t})$ для напряженности электрического поля $E = 0.001$. В начальный момент времени полярон находится на сайте с номером $n_0 = 601$. Это пример равномерного движения полярона по цепочке. Так же представленному на рис. 3 примеру соответствует третий слева график на рис. 2, тоже соответствующий значению $E = 0.001$.

На рис. 4 и 5 изображены участки зависимости скорости солитона V от внешнего электрического поля E, которые дают детальное представление устойчивого движения солитона ($dV/dE = V'_E > 0$). Рис. 5 представ-

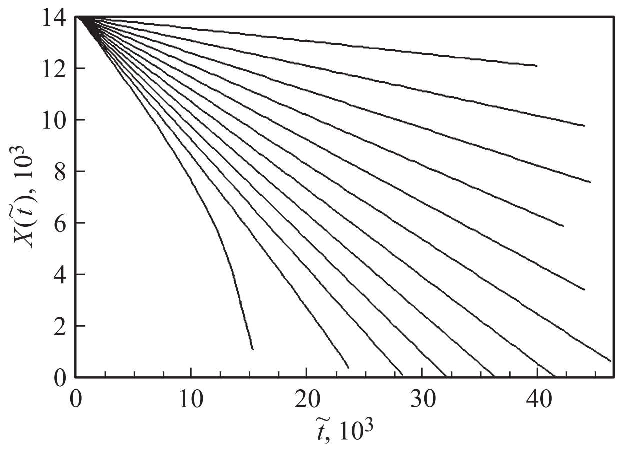

Рис. 2. Графики функции $X(\tilde{t})$ при $\varkappa = 1$, $\eta = 1.276$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$ и значениях напряженности электрического поля $E = 0.0001, 0.0002, 0.0003, \ldots, 0.0012$ для (безразмерного) времени $\tilde{t} = 47\,000$. Длина цепочки $N = 15\,001$ сайтов. Верхний график соответствует значению $E = 0.0001$.

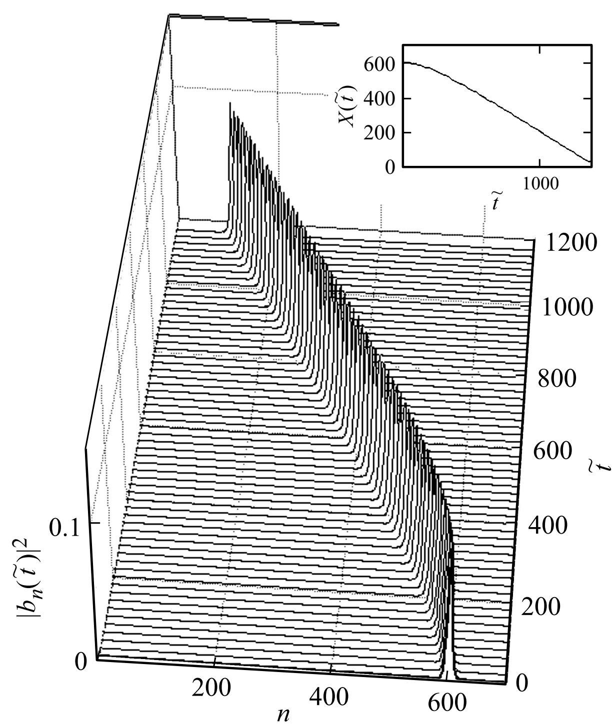

Рис. 3. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $X(\tilde{t})$ при $\varkappa = 1$, $\eta = 1.276$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$ и значении напряженности электрического поля $E = 0.001$ для (безразмерного) времени $\tilde{t} = 1200$. Длина цепочки $N = 701$ сайтов.

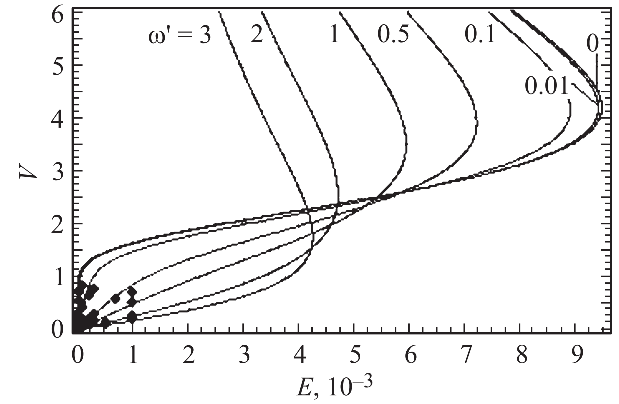

Рис. 4. Графики зависимости скорости солитона V от напряженности электрического поля E при $\varkappa = 1$, $\omega' = 3$, 2, 1, 0.5, 0.1, 0.01, 0, $\eta = 1.276$, $\omega = 1$, соответствующие устойчивому движению солитона (при $dV/dE = V'_E > 0$).

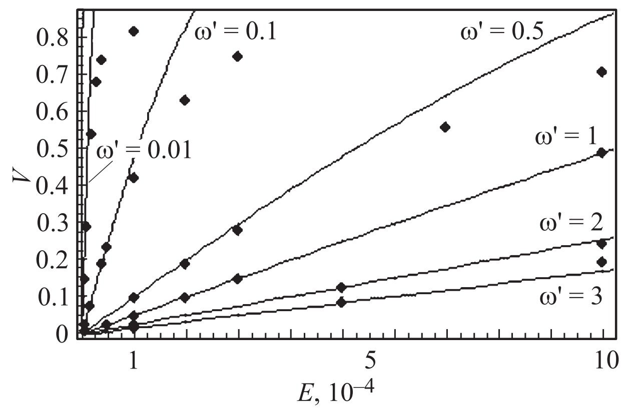

Рис. 5. Сравнение „теоретической" (—) (8), (9) и численной (•) скоростей солитона V от напряженности электрического поля E при $\varkappa = 1$, $\omega' = 3$, 2, 1, 0.5, 0.1, 0.01, 0, $\eta = 1.276$, $\omega = 1$ для участков линейной зависимости $V(E)$.

ляет собой увеличенную часть рис. 4. Из приведенных графиков видно, что область линейной зависимости расширяется с ростом величины ω'. При $\omega' \gtrsim 1$ (для $\varkappa = 1$) область линейной зависимости скорости солитона от поля простирается вплоть до величины критического значения электрического поля, при котором равномерное движение солитона становится невозможным. В этом случае вплоть до очень больших напряженностей электрического поля закон Ома выполняется с высокой точностью.

На рис. 4 представлено сравнение численной (•) и „теоретической" скоростей солитона V от напряженности электрического поля E. Заметим, что на этом рисунке предельному случаю $\omega' = 0$ соответствует крайняя левая кривая. Согласно теоретическим выводам, следующим из рис. 1 и 4, равномерное движение заряда возможно только в интервале $0 < E < E_{\max}(\omega')$. На представленных графиках точка $E_{\max}(\omega')$ соответствует точке перегиба кривой $V(E)$. Численные же эксперименты показывают, что этот интервал $0 < E < E_{\max-\text{numerical}}(\omega')$ значительно меньше, чем $0 < E < E_{\max}(\omega')$, и для $E > E_{\max-\text{numerical}}(\omega')$ равномерного движения заряда уже не наблюдается (рис. 2).

Моделирование неравномерного движения заряда в постоянном электрическом поле

Вычисления показывают, что для $E > E_{\max-\text{numerical}}(\omega')$ (так же и для $E > E_{\max}(\omega')$) в начале движения заряд испытывает блоховские осцилляции как целое, затем заряд теряет свою первоначальную форму. Чем больше значение E и чем больше оно превосходит $E_{\max-\text{numerical}}(\omega')$, тем быстрее начальное распределение (в виде обратного гиперболического косинуса вида (6)) теряет свою первоначальную форму. Далее заряд движется по направлению поля, совершая колебания, период которых близок к периоду блоховских осцилляций $T_{BL} = 2\pi/E$. Никаких особенностей в характере движения частицы в поле при „переходе" E через $E_{\max}(\omega')$ не происходит.

Как и в описанном выше случае моделирования равномерного движения заряда в электрическом поле, для моделирования неравномерного движения мы помещали в цепочку в начальный момент времени заряд, соответствующий стационарному решению уравнений (2), (3) в отсутствие внешнего поля. Начальные значения $|b_n(0)|$ тоже были выбраны в виде обратного гиперболического косинуса вида (6). Но в данном случае были выбраны бóльшие значения напряженности электрического поля E.

На рис. 6 представлены графики функции $X(\tilde{t})$ для значений напряженности электрического поля E, начиная со значения $E = 0.001$. Этому значению $E = 0.001$ на рис. 6 соответствует единственный график в виде прямой линии, что указывает на равномерное движение заряда по цепочке. Все остальные графики на рис. 6 указывают на колебательный режим движения заряда по цепочке. Период блоховских осцилляций для $E = 0.001$ равен $T_{BL} = 2\pi/E \approx 6283$. Из чего следует, что график для $E = 0.001$ показан за время, соответствующее примерно 3.6 блоховским периодам. То есть мы видим, что этот график действительно указывает на равномерное движение, а не является частью графика при колебательном движении полярона. Заметим, что на рис. 2 тоже есть график, соответствующий $E = 0.001$, это третий график слева и он показан за время $\tilde{t} \approx 28\,000$, что равно примерно 4.5 блоховских периодов.

На графиках рис. 6, соответствующих колебательному режиму движения, хорошо видно, что с увеличением значения напряженности электрического поля период колебаний уменьшается и всегда примерно равен $T_{BL} = 2\pi/E$. Обратим внимание на график функции $X(\tilde{t})$ для $E = 0.002$ на рис. 6, это самый нижний график, не считая графика для $E = 0.001$. Его вид для $\tilde{t} > 10\,000$

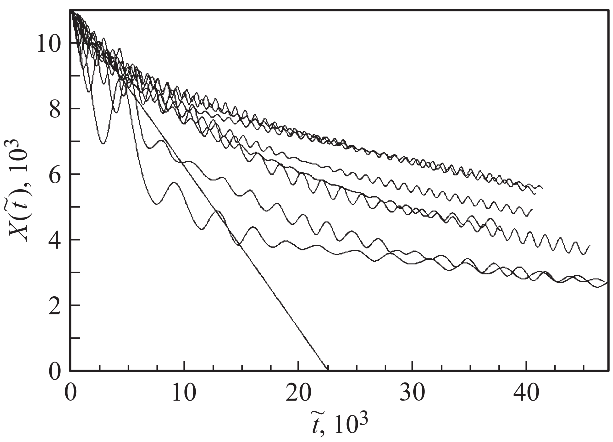

Рис. 6. Графики функции $X(\tilde{t})$ при $\varkappa = 1$, $\eta = 1.276$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$ и значениях напряженности электрического поля $E = 0.001, 0.002, 0.003, \ldots, 0.008$ для (безразмерного) времени $\tilde{t} = 47\,000$. Длина цепочки $N = 12\,001$ сайтов.

некорректен в том смысле, что заряд уже начал отражаться от левого края цепочки, и это хорошо видно на графике. Кроме того, при колебательном режиме движения, если в начальный момент времени в движении участвует заряд в целом, как в данном случае, то центр масс заряда смещается на максимальную блоховскую амплитуду $A_{BL} = 4\eta/E$. Для $E = 0.002$ максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} = 4\eta/E \approx 2500$, а на графике мы видим, что центр массы полярона сместился сразу на 4000 сайтов. На самом деле для этого значения напряженности электрического поля $E = 0.002$ начальный полярон при мгновенном включении электрического поля двигается почти равномерно, слегка оседая по высоте, и, только пройдя примерно 1500, целиком входит в блоховские осцилляции. Только начиная со значения электрического поля $E = 0.005$ полярон после начала движения сразу уходит на максимальную блоховскую амплитуду $A_{BL} = 4\eta/E$.

На рис. 7 показан пример движения полярона в короткой цепочке длиной $N = 701$ для большого значения напряженности электрического поля $E = 0.03$. Период блоховских осцилляций для $E = 0.03$ равен $T_{BL} = 2\pi/E \approx 209$, максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} = 4\eta/E \approx 170$. Начальный полярон вида (6) имеет характерный размер примерно 15 и высоту около 0.1. При отсутствии электрического поля такое начальное поляронное состояние практически сохраняет свою форму и не сдвигается из своего начального положения как угодно долго, так как выбрана цепочка с большим трением. Заметим, что при отсутствии трения или при очень маленьком трении в цепочке полярон сохранит свое начальное положение только в случае, когда он находится в центре цепочки [21,22]. Поскольку выбрана цепочка с большим трением и начальный полярон не сдвигается из начального положения при отсутствии поля, то при мгновенном включении поля в процессе первой осцилляции заряд локализуется в пределах примерно одной максимальной блоховской амплитуды по направлению поля.

Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ наглядно демонстрируют, как начальный полярон вида (6) быстро разваливается, и, совершая блоховские осцилляции, движется по направлению поля в цепочке. Также на рис. 7 хорошо заметно, как в ходе последней по времени пятой осцилляции заряд отразился от конца цепочки, а не от границы, обусловленной полем, как в предыдущих осцилляциях.

Характер движения заряда в электрическом поле сильно зависит от начального распределения заряда по цепочке. На рис. 7 представлен пример движения заряда по цепочке из начального поляронного состояния вида (6). Посмотрим, как ведет себя в поле заряд, находящийся на одном сайте. Поместим заряд на один сайт в центре цепочки. На рис. 8 показано распределение такого разряда по цепочке в отсутствие электрического поля. Прямая линия в центре графика показывает заряд величиной в единицу в центре цепочки при левой шкале 0.12. Хорошо видно, как заряд быстро растекается по всей цепочке, отражается от концов цепочки и постепенно распределяется равномерно по цепочке.

Совершенно по-другому распределяется по цепочке единичный заряд в электрическом поле. На рис. 9 показан следующий пример. В начальный момент времени заряд находится на одном сайте в центре цепочки, поле включается мгновенно в начальный момент времени,

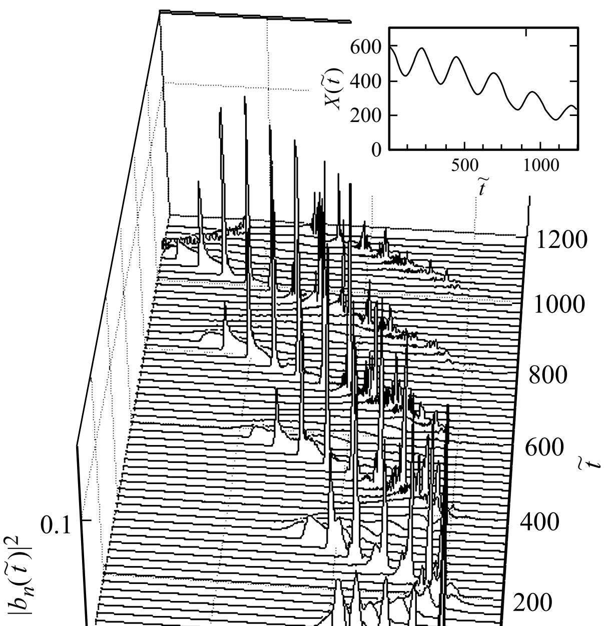

Рис. 7. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $X(\tilde{t})$ при $\varkappa = 1$, $\eta = 1.276$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$, значение напряженности электрического поля $E = 0.03$, для (безразмерного) времени $\tilde{t} = 1200$. Длина цепочки $N = 701$ сайтов.

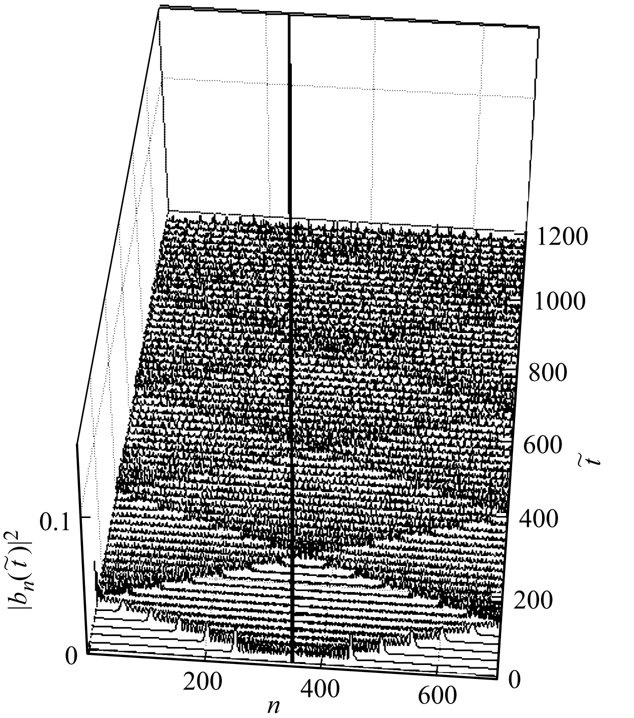

Рис. 8. Графики функции $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $X(\tilde{t})$ при $\varkappa = 1$, $\eta = 1.276$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$, при отсутствии электрического поля для (безразмерного) времени $\tilde{t} = 1200$. Длина цепочки $N = 701$ сайтов. В начальный момент времени заряд находится на одном сайте в центре цепочки, $u_n^0 = 0$ для всех n.

значение напряженности электрического поля $E = 0.03$ такое же, как в примере на рис. 7. Графики функции $|b_n(\tilde{t})|^2$ показывают, что заряд не растекается по всей цепочке, как при отсутствии поля.

Начальный единичный заряд сначала растекается в обе стороны от центра цепочки, но локализуется электрическим полем в пределах примерно по одной максимальной блоховской амплитуде в обе стороны от центра цепочки. Далее заряд движется, осциллируя по цепочке, с периодом колебаний близким к блоховскому периоду для заданного значения напряженности электрического поля $E = 0.03$. Характер и скорость движения в этом случае значительно отличаются от показанных в примере на рис. 7.

Численное моделирование показывает, что характер движения и скорость заряда в поле сильно зависят от характерного размера как начального распределения заряда в цепочке, так и от характерного размера устоявшегося полярона в цепочке при заданных параметрах. В примерах на рис. 7 и 9 показаны отличия в распределении заряда по цепочке при колебательном режиме движения в зависимости от начального распределения.

Для $\varkappa > 1$ (при $\eta = 1.276$) существует возможность при одинаковых параметрах цепочки и одном и том же напряжении электрического поля получить и равномерное движение заряда и колебательное в зависимости от начального распределения заряда, например, изменяя начальное распределение вида (6). Возьмем начальные значения $|b_n(0)|$ в виде растянутого обратного гиперболического косинуса:

$$|b_n(0)| = \frac{\sqrt{2}}{4}\sqrt{\frac{\varkappa}{\xi|\eta|}}\,\mathrm{ch}^{-1}\left(\frac{\varkappa(n-n_0)}{4\xi|\eta|}\right), \qquad (11)$$

ξ — коэффициент растяжения.

Возьмем такое значение напряженности электрического поля E, при котором существует равномерное движение заряда при начальных значениях $|b_n(0)|$ в виде нерастянутого обратного гиперболического косинуса вида (6). При выбранном значении E будем постепенно увеличивать или уменьшать значение ξ. В зависимости от выбранных параметров, до некоторого значения ξ ($\xi \neq 1$), начальный растянутый обратный гиперболический косинус вида (11), несмотря на воздействие поля, достаточно быстро принимает форму нерастянутого обратного гиперболического косинуса вида (6) (или устоявшегося распределения заряда). В этом случае заряд, после небольших колебаний в начальное время, далее движется по цепочке равномерно.

Если значение ξ взято достаточно отличающимся от единицы (для выбранного значения E), то заряд теряет свою первоначальную форму и, осциллируя, движется по цепочке по направлению поля. В этом случае движение заряда может быть аналогичным движению заряда для случая, описанного выше, а именно, когда начальное

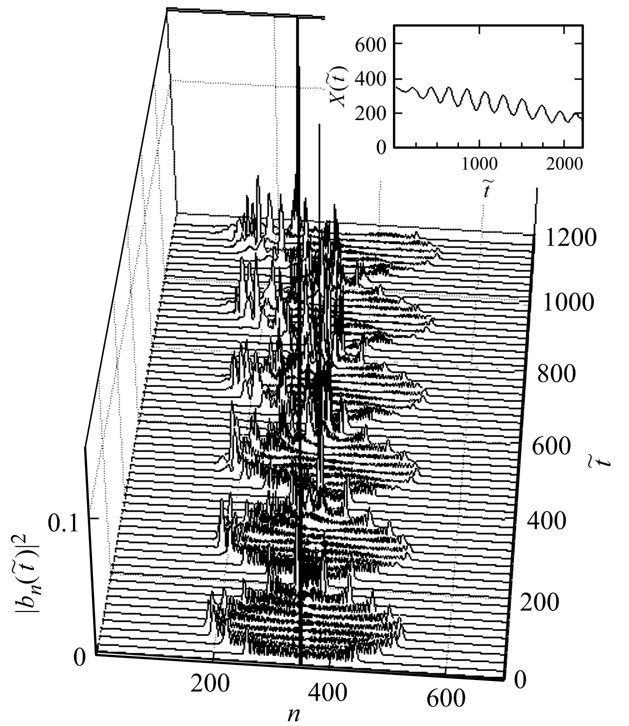

Рис. 9. Графики функции $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $X(\tilde{t})$ при $\varkappa = 1$, $\eta = 1.276$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$, значение напряженности электрического поля $E = 0.03$ для (безразмерного) времени $\tilde{t} = 1200$. Длина цепочки $N = 701$ сайтов. В начальный момент времени заряд находится на одном сайте в центре цепочки, $u_n^0 = 0$ для всех n.

распределение взято в виде нерастянутого обратного гиперболического косинуса вида (6), но величина напряженности электрического поля E превышает значения, при которых существует равномерное движение заряда. Мы написали „может быть аналогичным“, так как характер распределения заряда может заметно изменяться в зависимости от параметров цепочки.

Выводы

Мы рассмотрели моделирование равномерного движения заряда для следующих значений параметров цепочки: $\varkappa = 1$, $\eta = 1.276$. При выбранных значениях параметров существует возможность движения заряда с постоянной скоростью по направлению поля в цепочке, сохраняя свою форму. Такое равномерное движение и достаточно хорошее (рис. 4) соответствие „теоретической“ и численной зависимостей скорости заряда V от напряженности внешнего электрического поля E обусловлено тем, что при таких параметрах цепочки характерный размер полярона в цепочке $\lim_{\tilde{t}\to\infty} d(\tilde{t}) \approx 15$, это широкий полярон, располагается на достаточно большом количестве сайтов.

При увеличении $\varkappa > 1$ (для $\eta = 1.276$) устоявшееся поляронное распределение заряда становится „ýже“. Вследствие этого, при $\varkappa = 2$ и более становятся хорошо заметны колебания Пайерлса–Набарро, обусловленные дискретностью решетки [20]. Таким образом, при $\varkappa \geq 2$ равномерное движение заряда носит слабо колебательный характер, при котором форма заряда сохраняется „в периоде“.

Вычисления показывают, что равномерное движение заряда при $\varkappa = 2$ и 3 существует, так же как и для $\varkappa = 1$. А именно равномерное движение заряда возможно только в интервале $E < E_{\max-\text{numerical}}(\omega')$. Для $E > E_{\max-\text{numerical}}(\omega')$ равномерного движения заряда не наблюдается, начальная форма распределения заряда „разваливается“, заряд, совершая колебательные движения с блоховским периодом, движется по цепочке по направлению поля, причем в начале движения амплитуда колебаний заряда близка к максимальной блоховской амплитуде колебаний.

Однородной последовательности из $PolyG/PolyC$ нуклеотидных пар соответствуют следующие значения безразмерных параметров: константа связи $\varkappa = 4$, матричные элементы перехода частицы с одного сайта на другой — $\eta = 1.276$, см. [23,24]. Таким параметрам соответствует устоявшееся поляронное распределение заряда [25] располагающееся всего на нескольких сайтах, т.е. очень „узкий пик“. В связи с этим возникают сложности при моделировании равномерного движения заряда в такой цепочке. Например, для $\omega = 1$ и $\omega' = 1$ находится одно значение $E = 0.09$, при котором заряд движется с постоянной скоростью по направлению поля в цепочке, совершая небольшие колебания и сохраняя свою форму. При малых значениях напряженности электрического поля $E < 0.09$ заряд совсем не движется (стоит на месте), а при увеличении $E > 0.09$ заряд „разваливается“ и, совершая колебательные движения, движется по цепочке по направлению поля. Как и в ранее рассмотренных случаях, эти колебания соответствуют блоховским колебаниям.

Ранее в работе [26] нами были рассмотрены примеры блоховских осцилляций в модели Холстейна в зависимости от различных значений параметра $\varkappa$. Аналогичные результаты были получены позже в работе [27] при исследовании блоховских осцилляций в модели Пейрарда–Бишопа–Холстейна. Кроме описанных здесь вариантов движения и распределения заряда по цепочке, в работе [28] была показана возможность неравновесного движения заряда в $PolyG/PolyC$ цепочке ДНК.

Из проведенных расчетов следует, что в рассматриваемой системе могут реализоваться сложные динамические режимы, зависящие от 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 решетки в цепочке. При фиксированных параметрах системы, изменяя только начальное распределение заряда и величину напряженности электрического поля, можно наблюдать самые разнообразные режимы движения и распределения заряда в цепочке.

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

Работа поддержана проектами РФФИ № 16-07-00305, РНФ № 16-11-10163.

Список литературы

[1] *Davydov A.S.* // J. Theor. Biology. 1973. Vol. 38. P. 559–569.
[2] *Davydov A.S.* // J. Theor. Biology. 1977. Vol. 66. P. 379–387.
[3] *Davydov A.S.* // Solitons in Molecular systems. Reidel Publ. Comp., Boston, USA, 1985. 413 p.
[4] *Scott A.C.* // Phys. Rep. 1992. Vol. 217. N 1. P. 1–67.
[5] *Lakhno V.D.* // Int. J. Quantum Chem. 2008. Vol. 108. P. 1970–1981.
[6] *Nanobioelectronics* — for Electronics, Biology and Medicine. Eds. A. Offenhausser. Rinald N.Y.: Springer, 2009.
[7] *Storm A.J., Van Noort J., De Vries S., Dekker C.* // Appl. Phys. Lett. 2001. Vol. 9. P. 3881–3883.
[8] *De Pablo P.J.*, et. al. // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 85. P. 4992–4995.
[9] *Fink H.W., Schönenberger C.* // Nature. 1999. Vol. 398. P. 407–409.
[10] *Okahata Y., Kobayashi T., Tanaka K., Shimomura M.* // J. Am. Chem. Soc. 1998. Vol. 120. P. 6165–6166.
[11] *Porath D., Bezryadin A., De Vries S., Dekker C.* // Nature. 2000. Vol. 403. P. 635–638.
[12] *Cai L., Tabata H., Kavai T.* // Appl. Phys. Lett. 2000. Vol. 77. P. 3105–3106.

[13] *Yoo K.-H.*, et. al. // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 87. P. 198102.
[14] *Kasumov A.Y.*, et. al. // Science. 2001. Vol. 291. I. 5502. P. 280–282.
[15] *Chepeliaskii A.* et. al. // New J. Phys. 2011. Vol. 13. P. 063046.
[16] *Lakhno V.D.* Davydov's Solitons in DNA, Chapter in „Self-Organization of Molecular Systems — From Molecules and Clusters to Nanotubes and Proteins". Eds. N. Russo, V.Ya. Antonchenko, E. Kryachko. Springer, 2009. P. 255-273.
[17] *Lakhno V.D.* // J. Biol. Phys. 2000. Vol. 26. P. 133–147.
[18] *Holstein T.* // Ann. Phys. 1959. Vol. 8. P. 343–389.
[19] *Lakhno V.D.* // Int. J. Quant. Chem. 2010. Vol. 110. P. 127–137.
[20] *Lakhno V.D., Korshunova A.N.* // Eur. Phys. J. B. 2011. Vol. 79. P. 147–151.
[21] *Коршунова А.Н., Лахно В.Д.* // Математическая биология и биоинформатика. 2016. Т. 11. Вып. 2. С. 141-158.
[22] *Коршунова А.Н., Лахно В.Д.* // Математическая биология и биоинформатика. 2017. Т. 12. Вып. 1. С. 204-223.
[23] *Voityuk A.A., Rösch N., Bixon M., Jortner J.* // J. Phys. Chem. B. 2000. Vol. 104. N 41. P. 9740–9745.
[24] *Jortner J., Bixon M., Voityuk A.A., Rösch N.* // J. Phys. Chem. B. 2002. Vol. 106. P. 7599–7606.
[25] *Lakhno V.D., Korshunova A.N.* // Mathematical biology and bioinformatics. 2010. Vol. 5. N 1. P. 1–29.
[26] *Lakhno V.D., Korshunova A.N.* // Eur. Phys. J. B. 2007. Vol. 55. P. 85–88.
[27] *Díaz E., Lima R.P.A., Domínguez-Adame F.* Phys. Rev. B. 2008. Vol. 78. P. 134303.
[28] *Korshunova A.N., Lakhno V.D.* // Physica E. 2014. Vol. 60. P. 206–209.