



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Коршунова А.Н., Лахно В.Д.

Блоховские осцилляции холстейновского полярона в процессе его равномерного движения по цепочке в постоянном электрическом поле

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Коршунова А.Н., Лахно В.Д. Блоховские осцилляции холстейновского полярона в процессе его равномерного движения по цепочке в постоянном электрическом поле // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 85. 30 с. doi:[10.20948/prepr-2019-85](https://doi.org/10.20948/prepr-2019-85)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-85>

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

А.Н. Коршунова, В.Д. Лахно

**Блоховские осцилляции холстейновского
полярона в процессе его равномерного
движения по цепочке в постоянном
электрическом поле**

Москва — 2019

А.Н. Коршунова, В.Д. Лахно

Блоховские осцилляции холстейновского полярона в процессе его равномерного движения по цепочке в постоянном электрическом поле

Проведённые вычисления показали, что блоховские осцилляции, возникающие в процессе колебательного режима движения полярона по цепочке, проявляются, хотя и в несколько иной форме, и при равномерном движении полярона по цепочке. Таким образом, в процессе стационарного движения полярона по цепочке полярон испытывает не только колебания Пайерлса – Набарро, но и небольшие осцилляции с блоховским периодом. 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.

Ключевые слова: нанобиоэлектроника, молекулярные провода, молекулярные цепочки, поляроны, ДНК, перенос заряда, модель Холстейна

A.N. Korshunova, V.D. Lakhno

Bloch oscillations of the Holstein polaron in the process of its uniform motion along a chain in a constant electric field

The performed calculations showed that the Bloch oscillations arising in the process of the oscillatory regime of polaron motion along the chain are also becomes apparent when the polaron moves uniformly along the chain, however in a somewhat different form. Thus, in the course of uniform polaron motion along the chain, the polaron tests not only Peierls – Nabarro oscillations, but also small oscillations with the Bloch period. It is shown that the polaron shape in the process of stationary motion in a constant electric field takes on an explicit structure. What is more, such characteristics of Bloch oscillations, as the period of the Bloch oscillations and the maximum Bloch amplitude, demonstrate low-amplitude components of the polaron.

Key words: nanobioelectronics, nanowire, molecular chain, polaron, DNA, charge transfer, Holstein model

Авторы выражают благодарность МСЦ РАН за предоставленные вычислительные ресурсы.

Работа поддержана проектами: РФФ №16-11-10163 и РФФИ №19-07-00406.

1. Введение

В представленной работе проведено исследование стационарного режима движения полярона в молекулярной цепочке. Моделирование движения полярона проведено при наличии постоянного электрического поля на основе модели Холстейна [1, 2]. Транспорт заряда в ДНК рассматривается во многих теоретических работах [3] – [11], что связано главным образом с возможностью использования одномерных молекулярных цепочек в качестве нанопроводов в нанобиоэлектронных устройствах [12] – [16]. Причём во многих работах полярон считается основным носителем тока в синтетических полинуклеотидных последовательностях [17] – [20].

Ранее на примере дискретной холстейновской молекулярной цепочки было показано [21], что в слабом электрическом поле происходят блоховские осцилляции полярона как целого при заданных параметрах цепочки. При тех же параметрах цепочки с увеличением напряжённости электрического поля начальный полярон может быстро развалиться, и далее заряд движется по цепочке в направлении поля, совершая блоховские осцилляции. Возможность равномерного движения заряда в однородной холстейновской цепочке в постоянном электрическом поле на очень большие расстояния была показана в работе [22]. Также в работе [22] было показано хорошее соответствие теоретической [23] и численной зависимостей скорости движения заряда с постоянной скоростью от напряжённости электрического поля.

Проведенные ранее исследования показывают, что в рассматриваемой системе могут реализоваться сложные динамические режимы, которые зависят от 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. Показано также [22], [24], что, изменяя только начальное распределение заряда и величину напряжённости электрического поля, можно наблюдать самые разнообразные режимы движения и распределения заряда в цепочке.

Для моделирования движения полярона в конечной цепочке мы помещали в начальный момент времени в цепочку полярон, близкий к устоявшемуся. То есть такой полярон, который со временем практически не меняет своей формы и не сдвигается из своего начального положения, если в цепочке нет дополнительных возбуждений. Кроме устоявшегося полярона в данной работе мы использовали растянутые начальные поляронные состояния, более широкие, нежели устоявшийся полярон.

Однородной последовательности из $PolyG/PolyC$ нуклеотидных пар соответствуют следующие значения безразмерных параметров: константа связи $\kappa = 4$, матричные элементы перехода частицы с одного сайта на другой – $\eta = 1.276$, частота колебаний n -го сайта $\omega = 0.01$, коэффициент трения $\omega' = 0.006$ (см. [25], [26]). Таким параметрам соответствует устоявшееся поляронное распределение заряда (см. [27]), располагающееся всего на нескольких сайтах, то есть очень

“узкий пик”. Моделировать движение заряда в цепочке с такими параметрами очень затруднительно, такой узкий начальный полярон в электрическом поле или просто не двигается, или сразу разваливается и переходит в колебательный режим движения с блоховскими осцилляциями, равномерного движения не наблюдается. В работе [28] нами была показана возможность неравновесного движения заряда в *PolyG/PolyC* цепочке ДНК при указанных выше параметрах. Показанное почти равномерное неравновесное движение заряда достигается специальным заданием формы поляронного состояния в начальный момент времени.

Для моделирования конкретного режима поведения заряда в электрическом поле необходимо подобрать подходящие параметры системы. Выбирая модельные параметры цепочек, мы можем значительно ускорить и упростить исследование как движения заряда в поле, так и характер распределения заряда по цепочке в процессе этого движения. Подбор параметров системы для каждого конкретного случая осуществляется не только в результате проведённых численных исследований, но и в соответствии с полученными результатами аналитического исследования системы в континуальном пределе [23].

2. 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 [20]. Для моделирования динамики квантовой частицы в цепочке из N нуклеотидных пар будем использовать гамильтониан Холстейна, в котором каждый сайт представляет собой двухатомную молекулу [1, 2]:

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

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:

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

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

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 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:

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

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

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

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

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

где b_n – амплитуды вероятности локализации заряда на n -ом сайте, 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 (а) – типа Рунге – Кутта 4-го порядка и (б) – 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.

3. 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:

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

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

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

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:

$$|b_n(0)| = \frac{\sqrt{2}}{4} \sqrt{\frac{\varkappa}{\xi|\eta|}} \operatorname{ch}^{-1}\left(\frac{\varkappa(n-n_0)}{4\xi|\eta|}\right), \quad (9)$$

где ξ – коэффициент растяжения, с помощью которого мы можем подобрать начальный полярон вида (9) максимально близким к устоявшемуся полярону, а также, мы можем взять начальный полярон уже или шире устоявшегося для формирования различных вариантов 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 вполне можно сказать, что на рис. 1 показаны графики функций вероятностей и смещений для устоявшегося полярона.

Таким образом, 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

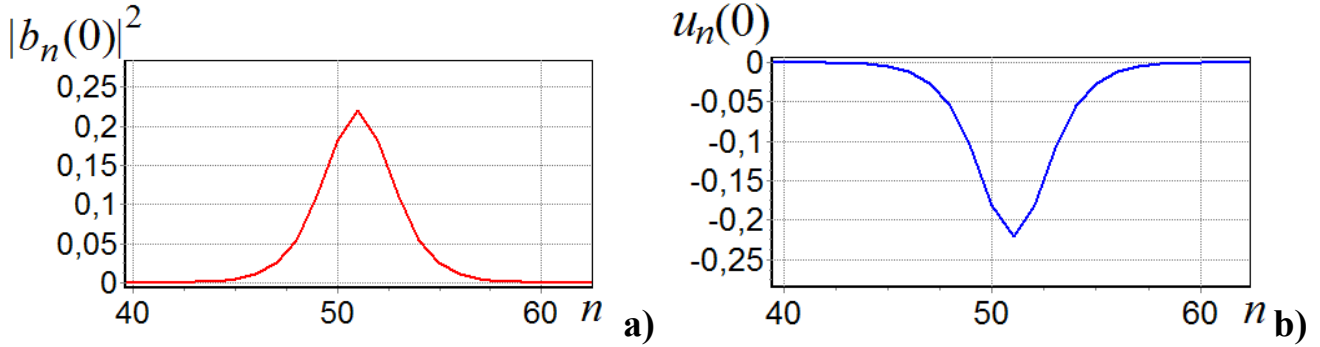


Рис. 1. Графики функций $|b_n(0)|^2$ и $u_n(0)$ для устоявшегося полярона в центре цепочки длиной $N = 101$ сайт для значений параметров цепочки $\varkappa = 4$ и $\eta = 2.4$.

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. Поле включается ”мгновенно” в начальный момент времени.

4. Блоховские осцилляции полярона в процессе колебательного режима движения в сильном электрическом поле

В данном исследовании рассматриваются блоховские осцилляции полярона в процессе равномерного движения полярона по цепочке в постоянном электрическом поле. Но сначала напомним о блоховских осцилляциях полярона в процессе колебательного режима движения в электрическом поле, когда колеблется полярон в целом. В работе [21] нами были подробно рассмотрены блоховские осцилляции полярона в постоянном электрическом поле в цепочке с параметрами $\eta = 1.276, \omega = 0.1, \omega' = 0.006$ для различных значений параметра $\varkappa = 4$. В этой работе представлены различные варианты характера распределения начального полярона по цепочке в зависимости от параметра $\varkappa = 4$. В частности, для значения $\varkappa = 1$ показано, что полярон в начальный период времени совершает блоховские осцилляции, сохраняя свою форму, и теряет свою форму постепенно, с течением времени. В этом случае наблюдается очень хорошее соответствие численных и теоретических характеристик блоховских осцилляций.

Характеристики блоховских осцилляций следующие. Период блоховских осцилляций $T_{BL} = 2\pi/E$. Максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} = 4\eta/E$. Максимальная скорость заряда в процессе блоховских осцилляций $V_{BL} = 2\eta$.

Рисунок 2 демонстрирует графики функций, которые характеризуют движение и распределение полярона по цепочке в электрическом поле. В представленном примере выбраны следующие значения параметров цепочки: $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$. Безразмерную величину напряжённости электрического поля $E = 0.1$ мы

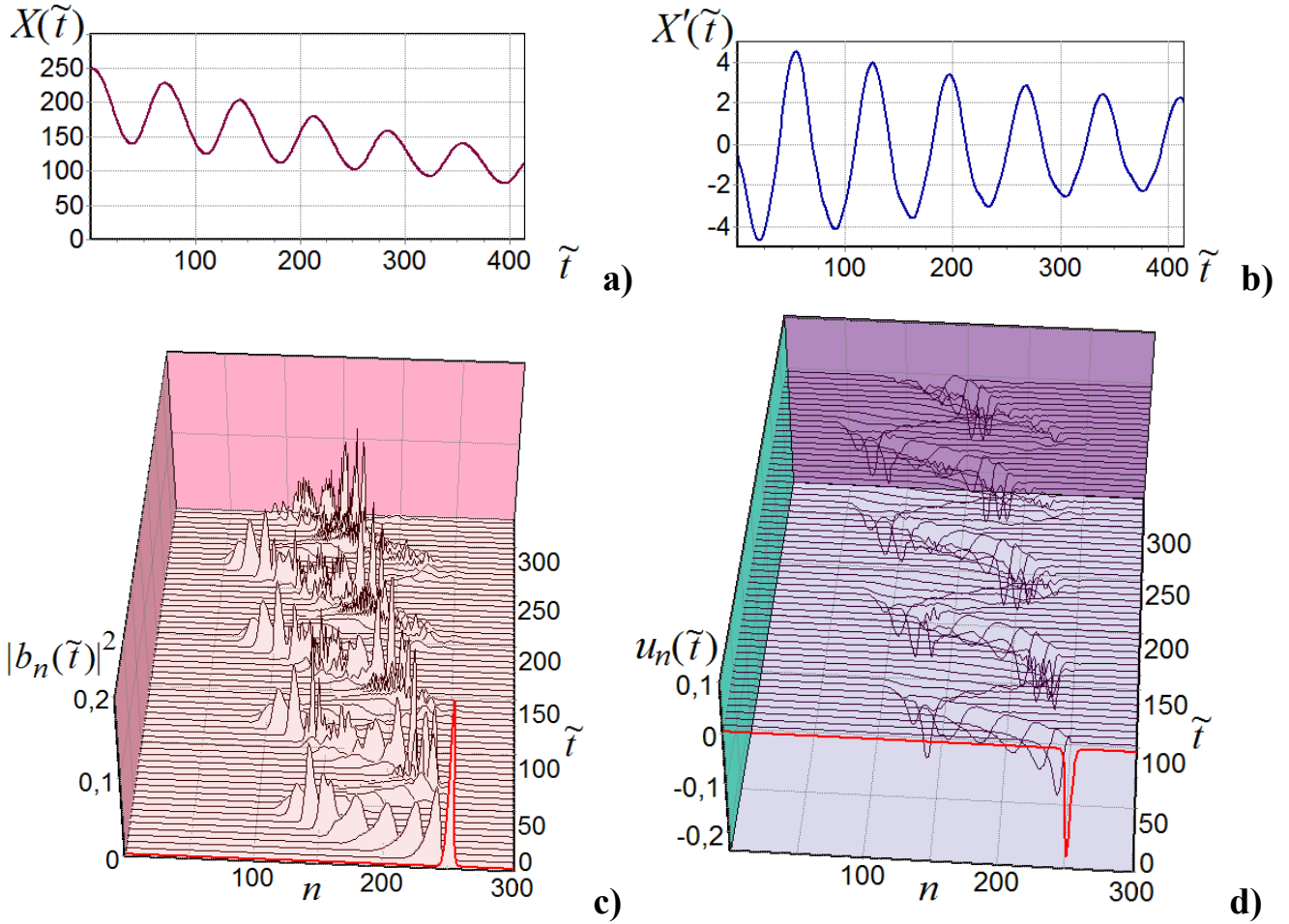


Рис. 2. Эволюция полярона в постоянном электрическом поле напряжённостью $E = 0.1$. Графики функций $X(\tilde{t})$, $X'(\tilde{t})$, $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $u_n(\tilde{t})$ в процессе движения полярона в цепочке с параметрами $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$ и длиной $N = 301$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 250$.

выбрали такой, при которой не существует равномерного движения, полярон сразу разваливается и переходит в колебательный режим движения. Начальные значения $|b_n(0)|$ были выбраны в форме обратного гиперболического косинуса вида (9) при $\xi = 0.95$, то есть начальный полярон максимально близок к устоявшемуся полюону в цепочке, который представлен на рис. 1. Центр полярона в начальный момент времени надодится на сайте цепочки с номером $n_0 = 250$.

На рисунке 2,а показаны графики функции

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

описывающие движение центра масс частицы. Период блоховских осцилляций для $E = 0.1$ равен $T_{BL} = 2\pi/E \approx 62.83$, максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} = 4\eta/E = 96$, максимальная скорость заряда в процессе блоховских осцилляций $V_{BL} = 2\eta = 4.8$. Таким образом, представленные на рис. 2 графики наглядно демонстрируют, что основные характеристики блоховских осцилляций

приблизительно соответствуют теоретическим характеристикам. Рис. 2,а рис. 2,с показывают, что в начальный период времени центр масс заряда смещается примерно на максимальную блоховскую амплитуду, со временем амплитуда колебаний уменьшается, заряд продолжает двигаться по цепочке в направлении поля.

Заметим, что максимальная скорость заряда в процессе блоховских осцилляций в показанном примере $V_{BL} \approx 4.7$ (см. рис. 2,б) совсем немного отличается от теоретической $V_{BL} = 2\eta = 4.8$, чего не будет наблюдаться при равномерном движении полярона по цепочке. На рисунке 2,д представлены графики функции $u_n(\tilde{t})$, которая описывает смещения сайтов цепочки при движении полярона. Рисунки 2,а и 2,д наглядно демонстрируют, что смещения сайтов цепочки соответствуют вероятностям распределения заряда по цепочке.

5. Колебания Пайерлса – Набарро в процессе равномерного движения полярона по цепочке в постоянном электрическом поле

Ранее, в работах [29], [22] 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 напряжённости электрического поля. С увеличением значения напряжённости 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:

$$V = dX/d\tilde{t}, X(\tilde{t}) = \sum_n |b_n(\tilde{t})|^2 \cdot n.$$

На рисунке 3 показаны графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ (рис. 3,а) и максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ (рис. 3,б) в процессе равномерного движения полярона по цепочке в постоянном электрическом поле напряжённостью $E = 0.018$. В представленном примере были выбраны следующие значения параметров цепочки: $\kappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$. Начальные значения $|b_n(0)|$ выбраны в форме обратного гиперболического косинуса вида (9) при $\xi = 0.95$, такой полярон максимально близок к устоявшемуся полюрону в цепочке. Длина цепочки $N =$

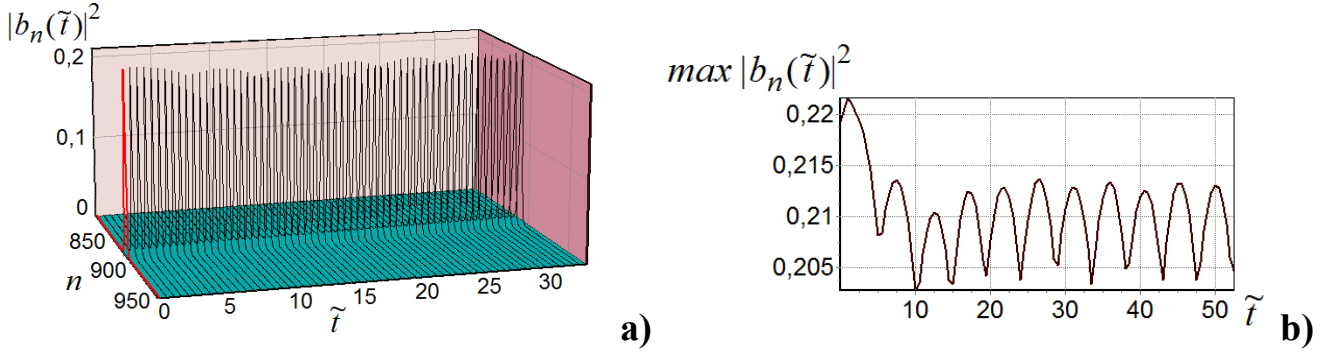


Рис. 3. Колебания Пайерлса – Набарро при движении полярона в постоянном электрическом поле напряжённостью $E = 0.018$. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ и максимума $|b_n(\tilde{t})|^2$ в процессе равномерного движения полярона в цепочке с параметрами $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$ и длиной $N = 1101$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте с номером $n_0 = 900$.

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 $V = dX/d\tilde{t} \approx 0.2146$. Этой скорости соответствует период колебаний Пайерлса – Набарро $T_{PN} = 1/V \approx 4.66$. График максимальных значений функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, представленный на рис. 3, b, показывает хорошее соответствие наблюдаемого периода колебаний с периодом колебаний Пайерлса – Набарро, вычисленным по формуле $T_{PN} = 1/V$.

Таким образом, ранее было показано, что в процессе колебательного режима движения в постоянном электрическом поле полярон испытывает блоховские осцилляции ([29], [22]). 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.

6. Элементы блоховских осцилляций полярона в процессе равномерного движения полярона 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: $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$.

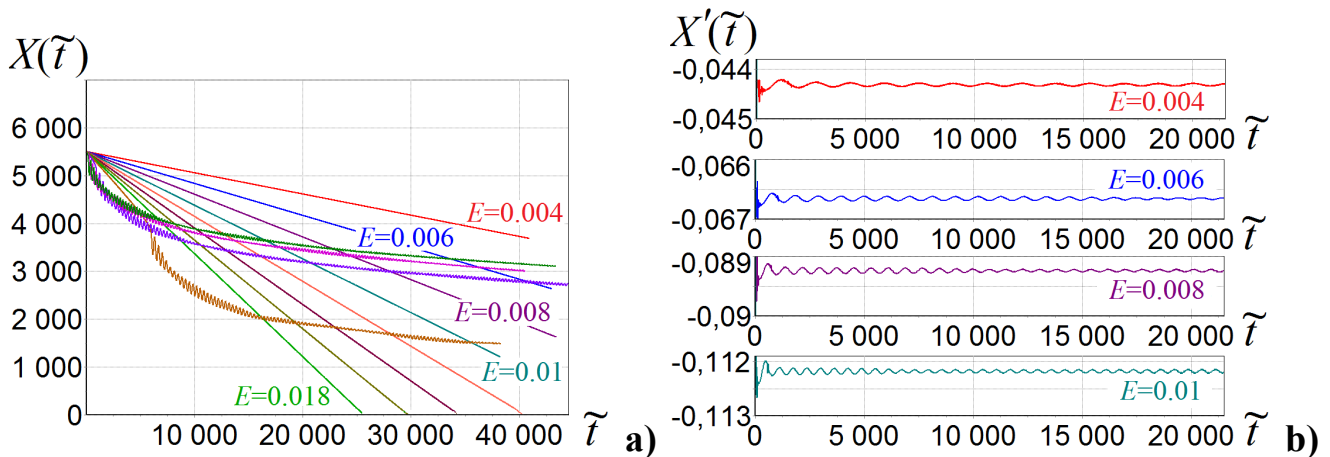


Рис. 4. Движение полярона в постоянном электрическом поле при различных значениях напряжённости поля. На рисунке а) – графики функции $X(\tilde{t})$ для $E = 0.004$ (верхний график), $0.006, \dots, 0.018$ – равномерное движение полярона, далее для $E = 0.02, 0.022, 0.024, 0.026$ – движение неравномерное. На рисунке б) – графики функции $X'(\tilde{t})$ для $E = 0.004, 0.006, 0.008, 0.01$. Значения параметров цепочки $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$. Центр полярона в начальный момент времени надодится на сайте цепочки с номером $n_0 = 5500$. Длина цепочки $N = 7001$ сайт.

Представленные на рис. 4,а графики функции $X(\tilde{t})$ демонстрируют линейную зависимость от \tilde{t} для значений напряжённости электрического поля $E = 0.004, E = 0.006, \dots, E = 0.018$, (см. рис. 4,а). Максимальное время вычислений для показанных графиков превышает безразмерное время $\tilde{t} = 40000$. Для каждого графика функции $X(\tilde{t})$ на рис. 4,а продолжительность вычислений превышает десятки блоховских периодов, соответствующих заданной напряжённости электрического поля. Это несомненно свидетельствует о том, что для указанных значений напряжённости электрического поля мы наблюдаем равномерное движение полярона по цепочке.

Графики функции $X(\tilde{t})$ для значений напряжённости электрического поля от $E = 0.004$ до $E = 0.018$ на рис. 4,а выглядят прямыми линиями, значит, графики производных этих функций должны быть константами. На рис. 4,б представлены графики функций $X'(\tilde{t})$ для значений напряжённости электрического поля $E = 0.004, 0.006, 0.008, 0.01$. И эти графики не являются константами,

амплитуда колебаний функций $X'(\tilde{t})$ хотя и маленькая, но значения функций явно зависят от значения напряжённости E , и все эти функции имеют периоды, которые тоже явно зависят от значения напряжённости E . На рис. 4,b показаны четыре графика функций $X'(\tilde{t})$ для четырёх различных значений напряжённости электрического поля. Каждый из этих графиков показан с индивидуальной левой шкалой, так как эти графики, выведенные на рисунке с одной общей левой шкалой от -0.113 до -0.044 , выглядят прямыми линиями.

Амплитуды графиков функций $X'(\tilde{t})$, представленных на рис. 2,b и на рис. 4,b, сильно различаются. В начальный период движения полярона разница между максимумом и минимумом функции $X'(\tilde{t})$ на рис. 2,b равна примерно величине 8.4. Соответствующая величина для $X'(\tilde{t})$ рис. 4,b равна примерно величине 0.001. Максимальная скорость заряда в процессе блоховских осцилляций $V_{BL} = 2\eta$ и не зависит от напряжённости электрического поля. В дискретной решётке при произвольных значениях параметров цепочки максимальная скорость даже при колебательном режиме движения заряда достигается не всегда, это зависит от всего множества заданных параметров. Больше всего максимальное значение функции $X'(\tilde{t})$ зависит от формы начального поляронного состояния, причём как при колебательном режиме движения заряда, так и при равномерном движении полярона по цепочке. В следующем разделе мы это покажем.

Период блоховских осцилляций $T_{BL} = 2\pi/E$, для значений напряжённости электрического поля $E = 0.004, E = 0.006, E = 0.008, E = 0.01$ равен соответственно $T_{BL} \approx 1571, 1047, 785, 628$. Таким образом, за безразмерное время $\tilde{t} = 5000$ на представленных на 4,b графиках $X'(\tilde{t})$ должно быть соответствующее количество периодов, а именно 3.2 периода для $E = 0.004$, 4.8 периода для $E = 0.006$, 6.4 и 7.96 периодов для $E = 0.008$ и $E = 0.01$. Рисунок 4,b показывает, что примерно такое количество периодов имеют представленные графики функций $X'(\tilde{t})$. То есть функции $X'(\tilde{t})$ имеют периодические колебания, соответствующие блоховскому периоду колебаний для заданного значения напряжённости электрического поля. Следовательно, графики функций $X(\tilde{t})$ не являются строго прямыми линиями, а функции $X(\tilde{t})$ демонстрируют очень маленькие колебания, соответствующие блоховскому периоду колебаний для заданного значения напряжённости электрического поля в процессе равномерного движения полярона по цепочке.

На рисунке 5 показаны графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ того же самого вычислительного эксперимента, что и на рисунке 4. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ показаны в момент безразмерного времени $\tilde{t} = 40000$ в различных масштабах для левой шкалы. Графики показаны для тех же значений напряжённости электрического поля: $E = 0.004, 0.006, 0.008, 0.01$, которые взяты для функций $X'(\tilde{t})$, представленных на рис. 4,b. Соответственно, значения параметров цепочки те же самые: $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 5500$. Длина цепочки $N = 7001$ сайт.

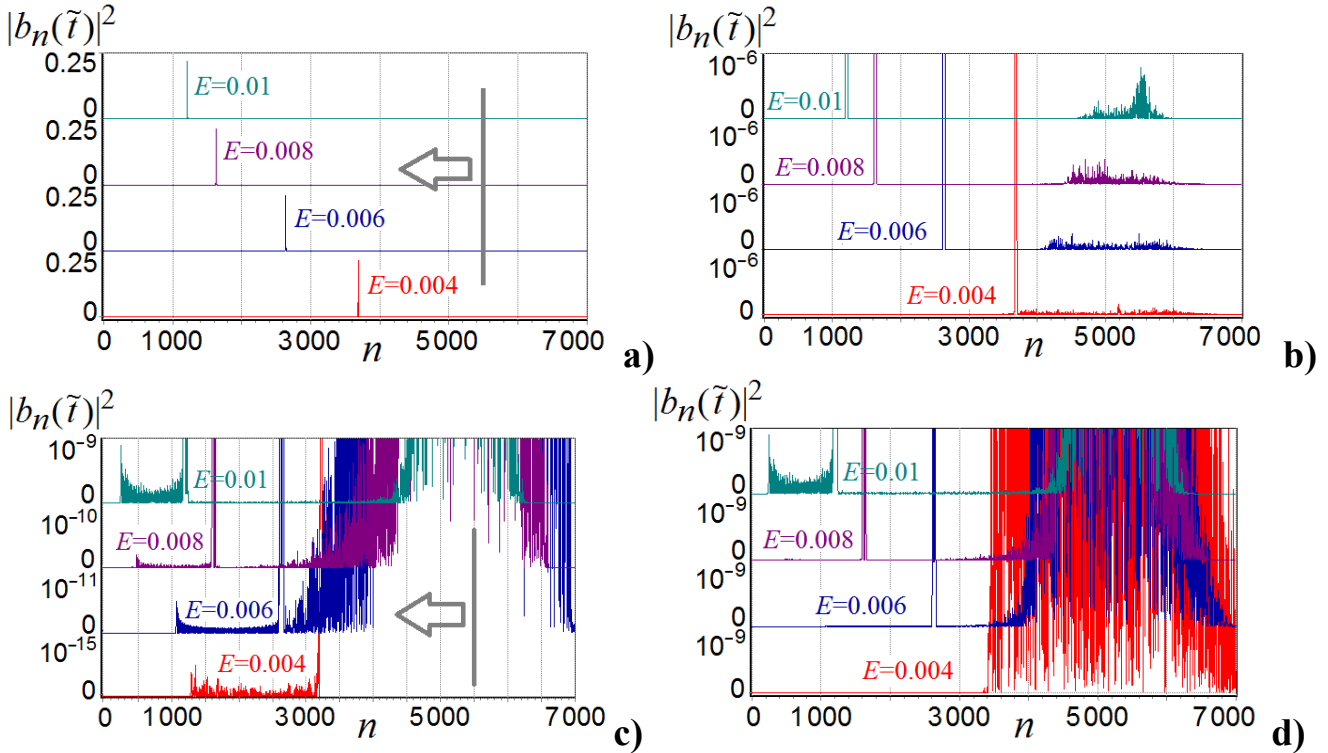


Рис. 5. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ для различных значений напряжённости электрического поля: $E = 0.004, 0.006, 0.008, 0.01$ в момент безразмерного времени $\tilde{t} = 40000$. Значения параметров цепочки $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 5500$. Длина цепочки $N = 7001$ сайт. Графики показаны в различных масштабах левой шкалы.

Вычисления показывают, что полярон, в масштабе от нуля до его максимума (см. рис. 5,а), в процессе движения никаких колебаний назад по цепочке не совершает, полярон движется равномерно по направлению поля. Далее мы покажем это подробнее. Но графики $X'(\tilde{t})$ указывают, что движущийся полярон испытывает очень малоамплитудные колебания, причём с блоховской амплитудой. Предположение, что это следствие погрешности вычислений, несостоятельно, поскольку никакая погрешность не может так чётко соответствовать периоду блоховских осцилляций для каждого заданного значения напряжённости электрического поля. Хотя, нужно отметить, вычисления проводились на грани допустимой погрешности.

На каждом из четырёх рисунков на рис. 5 показано по четыре графика функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ с одной общей нижней шкалой. Левая шкала у каждого графика своя, каждый выше расположенный график придвинут к верхней границе предыдущего графика, при этом нижерасположенный график не обрезается, а выводится на всё поле вышерасположенных графиков. Это сделано для удобства сравнения графиков.

При выбранных нами начальных значениях параметров для всех указанных значений напряженности поля E , полярон движется с постоянной скоростью по

направлению поля в цепочке, сохраняя свою форму. Так как мы рассматриваем величины $E > 0$, поэтому графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ двигаются справа налево, начиная от их положения в начальный момент времени $n_0 = 5500$.

На рисунке 5,а показаны графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в момент безразмерного времени $\tilde{t} = 40000$ в их полном размере, максимумы функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ немного меньше указанных максимальных размеров для каждой левой шкалы графиков. В увеличенном формате графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, показанные на рис. 5,а, практически не отличаются от графика функции $|b_n(0)|^2$ на рис. 1,а.

На рисунке 5,б представлены те же графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, что и на рис. 5,а, но в масштабе от 0 до 10^{-6} для каждого графика. В начальный момент времени центр полярона (для каждого значения E) находился на сайте с номером $n_0 = 5500$. Поскольку поле включается "мгновенно" в начальный момент времени, то мы и наблюдаем последствия такого воздействия в виде локализованного возбуждения на сайтах в районе сайта с номером $n_0 = 5500$, на котором находился центр начального полярона. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 5,б показаны всё в тот же момент безразмерного времени $\tilde{t} = 40000$. Мы видим, что в этот момент времени, для каждого значения напряжённости электрического поля, собственно полярон находится впереди по ходу его движения. Но около сайта, где находился полярон в начальный момент времени, сохранилось локализованное возбуждение, причём максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в этом возбуждении прямо пропорциональны значению поля E , а ширина его обратно пропорциональна величине E . Можно назвать это возбуждение остатком или начальным возбуждением.

На рисунке 5,с показаны те же графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, что и на рис. 5,а и 5,б, но в масштабе от 0 до 10^{-9} для каждого графика. В таком масштабе на графике функции $|b_n(\tilde{t})|^2$ для значения поля $E = 0.01$ (верхний график на рис. 5,с) перед собственно поляроном наблюдается малоамплитудное возбуждение. На этом же графике для меньших значений поля такие возбуждения полярона почти незаметны.

На рисунке 5,д показаны графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в разных масштабах для каждого значения напряжённости электрического поля в момент безразмерного времени $\tilde{t} = 40000$. Хорошо заметно, что во всех четырёх случаях перед основной частью полярона наблюдается малоамплитудное возбуждение. Для этого возбуждения тоже характерно, что максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в этом возбуждении прямо пропорциональны значению электрического поля E , а ширина его обратно пропорциональна величине E . Назовём это возбуждение предшествующим.

Максимальная амплитуда блоховских колебаний $A_{BL} = 4\eta/E$. Для $E = 0.004, 0.006, 0.008, 0.01$, $A_{BL} = 2400, 1600, 1200, 960$ соответственно. На графиках функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 5,д количество сайтов цепочки, на которых располагается предшествующее возбуждение, практически равно максимальной блоховской амплитуде для значений поля $E = 0.01, 0.008, 0.006$. Для $E = 0.004 - A_{BL} = 2400$, но на рис. 5,д для $E = 0.004$ амплитуда впереди идущего возбуждения выглядит

явно меньше. Это происходит потому, что собственно полярон (или его максимум) при значении поля $E = 0.004$ находится на сайте с номером примерно $n \approx 3650$, что хорошо видно на рис. 5,а и рис. 5,б. На рис. 5,д для $E = 0.004$ график функции $|b_n(\tilde{t})|^2$ выглядит так, что за центр тяжести полярона можно принять сайт $n \approx 3200$. На самом деле центр тяжести полярона еще находится в области сайтов начального локализованного возбуждения, и в представленном масштабе мы не можем видеть центра тяжести полярона, а видим на сайте с номером $n \approx 3200$ границу начального локализованного возбуждения. Таким образом, максимум пика полярона находится примерно на сайте с номером $n \approx 3650$, (рис. 5,а и рис. 5,б). Начало впереди идущего – предшествующего возбуждения находится примерно на сайте с номером $n \approx 1250$, (рис. 5,д). Следовательно, и для значения напряженности электрического поля $E = 0.004$ ширина распределения по сайтам предшествующего возбуждения примерно равна максимальной блоховской амплитуде $A_{BL} = 2400$.

Из представленных на рис. 4 и рис. 5 графиков следует, что при стационарном движении полярона по цепочке в постоянном электрическом поле полярон совершает очень незначительные по амплитуде осцилляции с блоховским периодом. Начальная форма полярона вида (9), близкая к форме устоявшегося полярона, изменяется. Форма полярона при стационарном движении в поле принимает явно выраженную структуру по направлению поля: 1 – начальное возбуждение, сохраняющее своё положение в цепочке, 2 – участок с почти нулевыми значениями функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, 3 – собственно полярон, близкий по форме к начальному, 4 – впереди идущее предшествующее возбуждение. Ширина распределения по сайтам предшествующего возбуждения примерно равна максимальной блоховской амплитуде. Ширина распределения по сайтам начального возбуждения тоже примерно около максимальной блоховской амплитуды, но не так близко, как в случае предшествующего возбуждения. Максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на сайтах, где находятся начальное и предшествующее возбуждения, прямо пропорциональны значению напряженности электрического поля, и отличаются друг от друга по величине на несколько порядков.

Остаются вопросы: как формируется структура полярона при его стационарном движении в поле в начальный период времени после включения поля и как возникают малоамплитудные колебания с блоховским периодом, если максимум полярона движется без заметных колебаний строго по направлению поля?

7. Формирование структуры полярона в начальный период времени после включения поля в процессе равномерного движения полярона по цепочке в постоянном электрическом поле

Рассмотрим подробнее распределение по цепочке начального полярона в процессе его равномерного движения в электрическом поле напряжённостью $E = 0.018$. На рис. 4,а показан график функции $X(\tilde{t})$, описывающий положение центра масс полярона, для значения напряжённости электрического поля $E = 0.018$. График функции $X(\tilde{t})$ на рис. 4,а демонстрирует линейную зависимость от \tilde{t} для указанного значения напряжённости электрического поля $E = 0.018$ на протяжении безразмерного времени $\tilde{t} > 25000$, следовательно, при выбранном значении напряжённости электрического поля существует равномерное движение.

Рисунок 6 демонстрирует графики функций $X(\tilde{t})$, $X'(\tilde{t})$, $|b_n(\tilde{t})|^2$, которые характеризуют движение и распределение полярона по цепочке в электрическом поле напряжённостью $E = 0.018$. В представленном примере выбраны те же значения параметров цепочки, что и в предыдущем разделе: $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$. 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 $n_0 = 900$.

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 рис. 6 графики демонстрируют, что основные характеристики блоховских осцилляций приблизительно соблюдаются. График функции $X'(\tilde{t})$ на рис. 6,б демонстрирует период блоховских осцилляций, примерно равный теоретическому периоду: $T_{BL} \approx 349$. Амплитуда колебаний функции $X'(\tilde{t})$ очень маленькая. При этом графики функций $X(\tilde{t})$ на рис. 6,а и $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 6,с указывают на равномерное движение полярона по цепочке.

На рисунке 6,д показан тот же график функции $|b_n(\tilde{t})|^2$, что и на рис. 6,с, но в другом масштабе. Метка на левой шкале указывает значение 10^{-4} . Кроме того, на график выводятся только те значения функции $|b_n(\tilde{t})|^2$, которые меньше величины $5 \cdot 10^{-5}$. Значения $|b_n(\tilde{t})|^2 > 5 \cdot 10^{-5}$ на рис. 6,д как бы обрезаны для того, чтобы были видны малоамплитудные составляющие функции $|b_n(\tilde{t})|^2$.

График функции $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 6,д показывает, что, в самый начальный период времени, примерно равный половине блоховского периода, за безразмерное время $\tilde{t} \approx 175 \approx 349/2$, 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

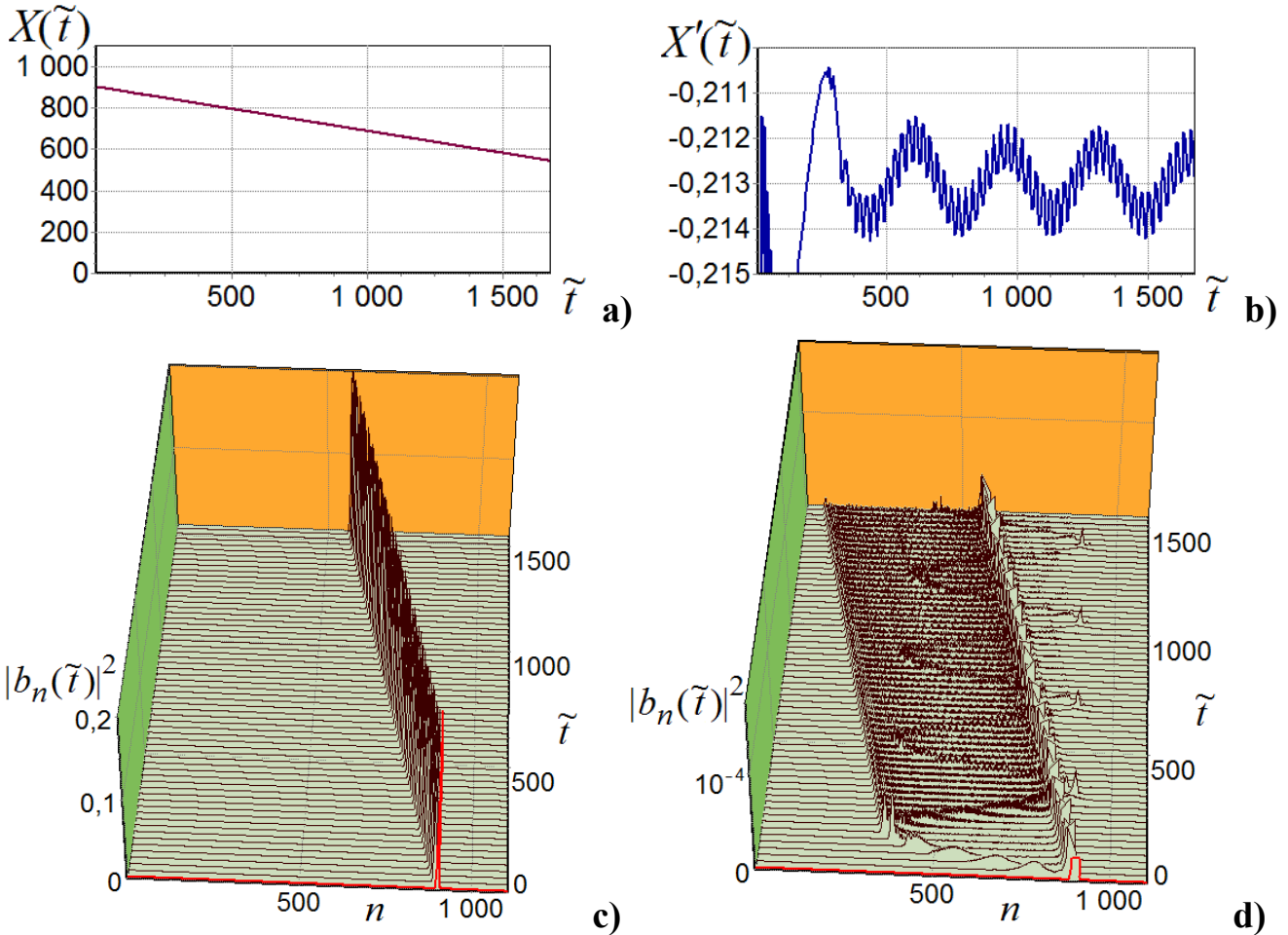


Рис. 6. Равномерное движение полярона в постоянном электрическом поле напряжённостью $E = 0.018$. Графики функций $X(\tilde{t})$, $X'(\tilde{t})$, $|b_n(\tilde{t})|^2$ в процессе движения полярона в цепочке с параметрами $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$ и длиной $N = 1101$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 900$.

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, см. рис. 2. 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 6,d хорошо видно, как за первую половину первого блоховского

периода перед поляроном выходит малоамплитудное возбуждение. Но в течение второй половины первого блоховского периода назад возвращается 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. Ранее мы назвали это возбуждение предшествующим.

В следующем разделе мы покажем, что предшествующее возбуждение, идущее перед основной частью полярона, формируется за счёт присутствия в цепочке главной части равномерно движущегося полярона, почти сохранившего свою первоначальную форму.

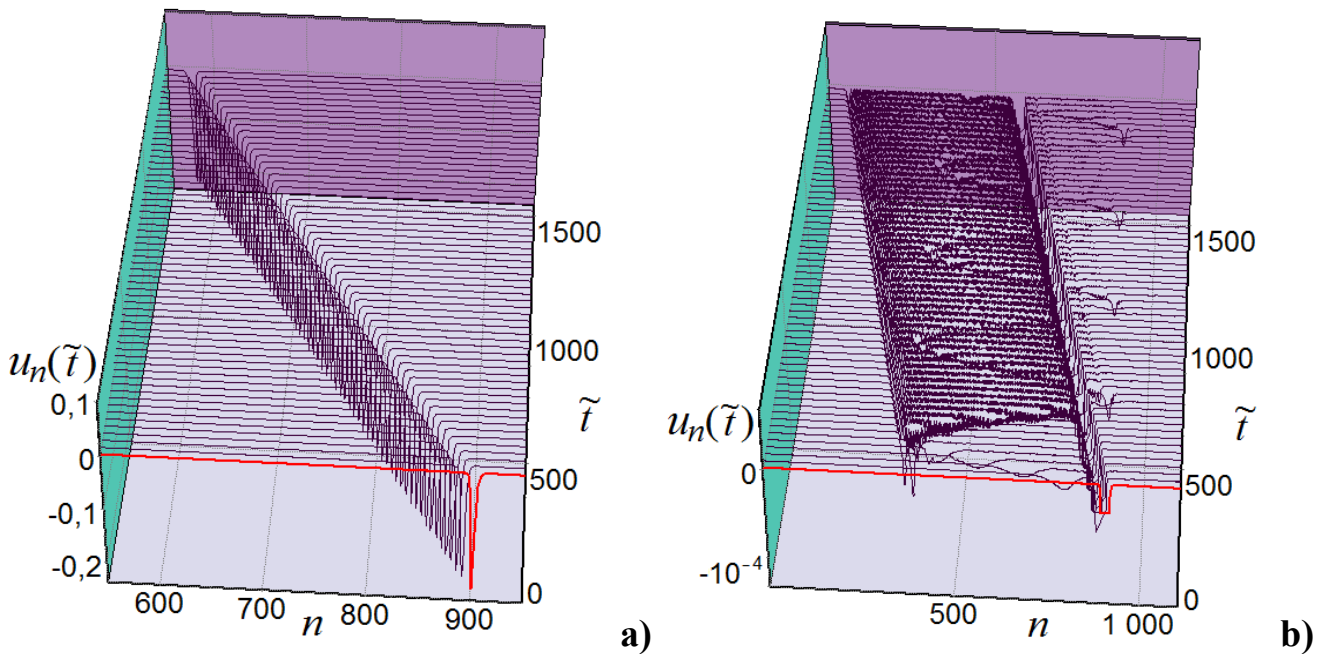


Рис. 7. Графики функций $u_n(\tilde{t})$ в процессе равномерного движения полярона в цепочке с параметрами $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$ и длиной $N = 1101$ сайтов.

Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 900$. Напряжённость электрического поля $E = 0.018$.

На рисунке 7 показаны графики функций $u_n(\tilde{t})$, которые показывают смещения сайтов цепочки в том же вычислительном эксперименте, который показан на рис. 6. На рис. 7,а показаны графики функций $u_n(\tilde{t})$ в полную величину по значениям функций. Но нижняя шкала на рис. 7,а 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 $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 6,с. На рисунке 7,б, по аналогии с рисунком 6,д, показаны обрезанные графики функций $u_n(\tilde{t})$. Нижняя метка на левой шкале равна -10^{-4} .

Из представленных на рис. 7,b графиков функций $u_n(\tilde{t})$ следует, что смещения сайтов соответствуют представленным на рис. 6,d функциям распределения вероятностей $|b_n(\tilde{t})|^2$. То есть соответствующие малоамплитудные возбуждения наблюдаются и в смещениях сайтов цепочки.

Покажем, что значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к области начального возбуждения, сильно зависят от формы начального поляронного состояния и от значений параметров ω (частота колебаний n -го сайта) и ω' (коэффициент трения). На рис. 6 выбран полярон, максимально близкий к устоявшемуся полярону в цепочке, а именно, начальные значения $|b_n(0)|$ были выбраны в форме обратного гиперболического косинуса вида (9) при $\xi = 0.95$. В следующем примере возьмём растянутое начальное поляронное состояние, шире устоявшегося полярона. Возьмём начальные значения $|b_n(0)|$ в форме обратного гиперболического косинуса вида (9) при $\xi = 1.5$. Все остальные условия и параметры цепочки те же самые, что и в примере на рис. 6. Как и в предыдущем примере, длина цепочки $N = 1101$ сайт, центр растянутого поляронного состояния в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 900$, напряжённость электрического поля $E = 0.018$.

Пример, представленный рис. 8, отличается от примера на рис. 6 только формой начального поляронного состояния. График функции $X(\tilde{t})$, представленный на рис. 6,a, полностью совпадает с тем же графиком на рис. 8,a. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $u_n(\tilde{t})$ для этого случая не представлены, так как они полностью совпадают с теми же графиками на рис. 6,c и на рис. 7,a.

На рисунке 8 графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $u_n(\tilde{t})$ обрезаны аналогично графикам на рис. 6,d и на рис. 7,b. Таким образом, на графиках рисунка 8 можно видеть и положение максимума движущегося полярона, и малоамплитудные составляющие полярона.

Представленные на рис. 8 графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $u_n(\tilde{t})$ показывают, что возбуждение, предшествующее полярону, никак не изменилось при изменении начального поляронного состояния. Следовательно, предшествующее возбуждение зависит более от значения напряжённости электрического поля, чем от формы начального поляронного состояния. Причём не изменилась не только ширина распределения по сайтам предшествующего возбуждения, равная максимальной блоховской амплитуде, но не изменились и значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к этому возбуждению.

При сравнении графиков функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 8,a и на рис. 6,c и графиков функций $u_n(\tilde{t})$ на рис. 8,b и на рис. 7,b хорошо видно, что существенно изменилось начальное возбуждение. Заметно увеличились значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $u_n(\tilde{t})$, относящиеся к области распределения этого возбуждения. Кроме того, увеличилась в пять раз амплитуда колебаний на графике функции $X'(\tilde{t})$. При этом сохранился период блоховских осцилляций, соответствующий напряжённости электрического поля $E = 0.018$. Сохранилось расположение начального возбуждения в пределах максимальной блоховской амплитуды, и оно по-прежнему совершает осцилляции с

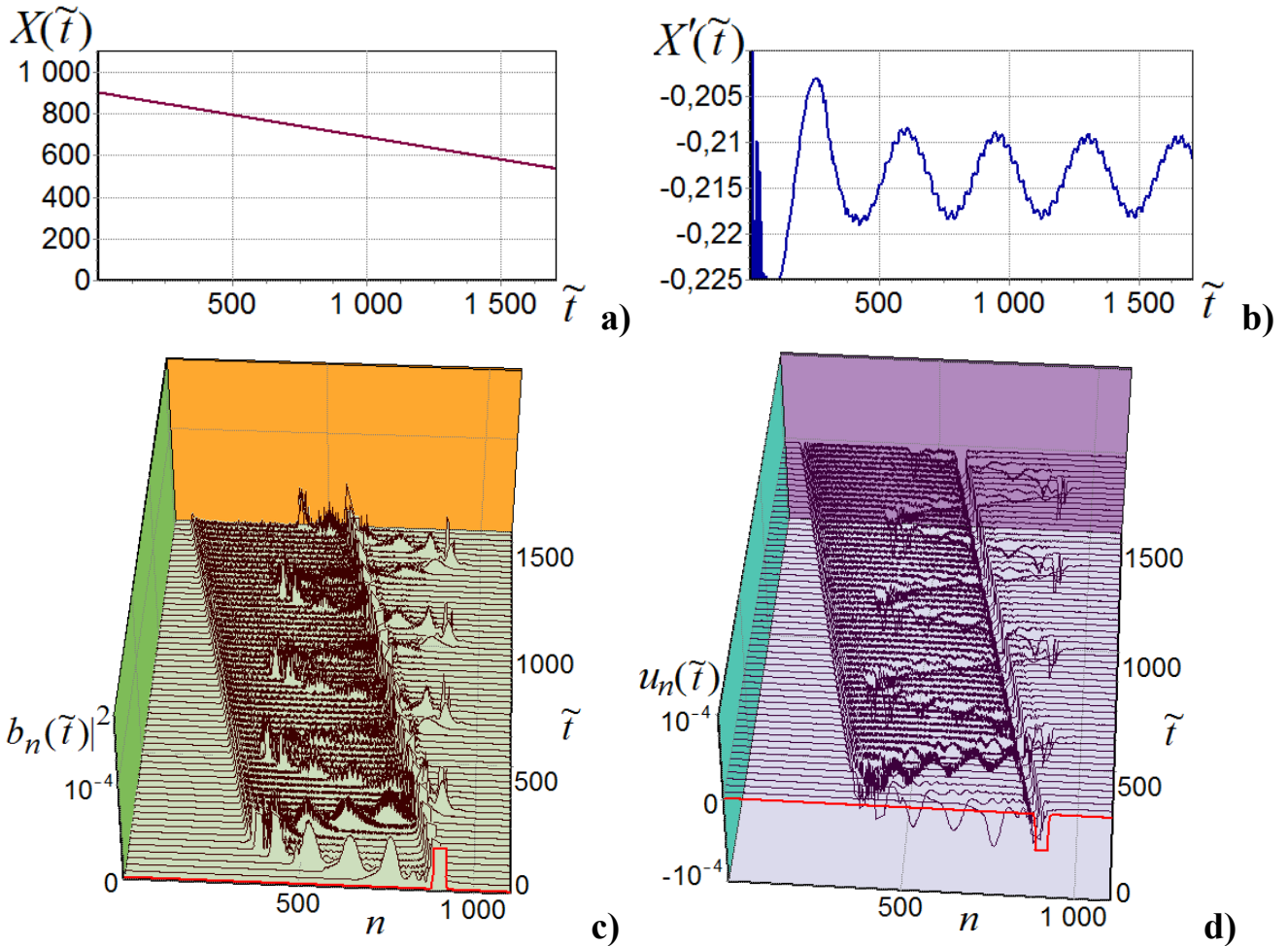


Рис. 8. Графики функций $X(\tilde{t})$, $X'(\tilde{t})$, $|b_n(\tilde{t})|^2$, $u_n(\tilde{t})$ в процессе равномерного движения полярона в цепочке с параметрами $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$ и длиной $N = 1101$ сайтов. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 900$. Задано растянутое начальное поляронное состояние в форме обратного гиперболического косинуса вида (9) при $\xi = 1.5$. Напряжённость электрического поля $E = 0.018$.

тем же блоховским периодом, что и в примере на рис. 6.

В примерах, представленных на рис. 9, показана зависимость предшествующего и начального возбуждений от значений параметров ω и ω' – от частоты колебаний сайтов цепочки и от коэффициента трения в цепочке. Начальное поляронное состояние на рис. 9 выбрано таким же, как в примере на рис. 6: начальные значения $|b_n(0)|$ были выбраны в форме обратного гиперболического косинуса вида (9) при $\xi = 0.95$, то есть полярон, максимально близкий к устоявшемуся полюрону в цепочке. Напряжённость электрического поля та же самая, $E = 0.018$. Примеры на рис. 9 и на рис. 6 отличаются друг от друга только значениями параметров ω и ω' . Скорость движения поляронов на рис. 9,а и рис. 9,б меньше, чем на рис. 6, при $\omega = 1$ и $\omega' = 1$.

Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 9 обрезаны аналогично графикам на

рис. 6. На представленных графиках хорошо видны и положения максимумов движущихся поляронов, и малоамплитудные составляющие поляронов. Сравнивая малоамплитудные составляющие функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 6 и на рис. 9, можно заметить, что при уменьшении значений параметров ω и ω' значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к начальному возбуждению, увеличиваются. Так же, как и в примере на рис. 8 для растянутого начального полярона, расположение начального возбуждения в пределах максимальной блоховской амплитуды сохранилось, период колебаний начального возбуждения так же соответствует периоду блоховских осцилляций для напряжённости электрического поля $E = 0.018$.

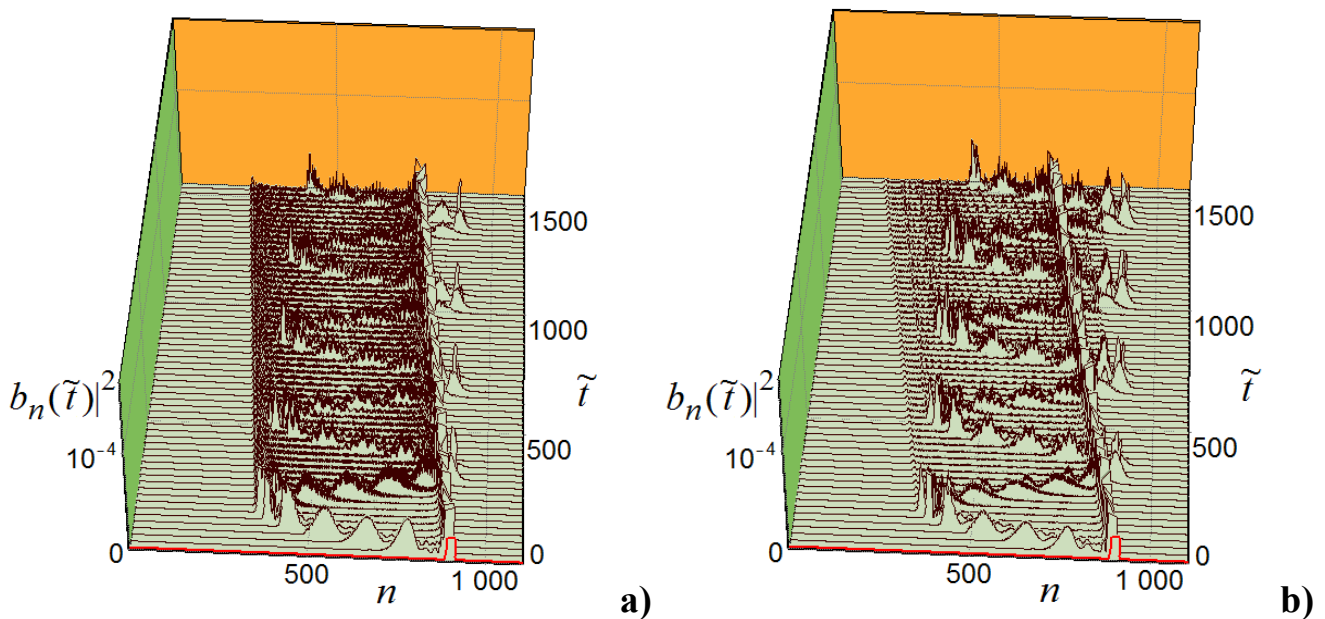


Рис. 9. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в процессе равномерного движения полярона в постоянном электрическом поле напряжённостью $E = 0.018$ в цепочке с параметрами $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$ и длиной $N = 1101$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 900$. Задано начальное поляронное состояние вида (9) при $\xi = 0.95$, близкое к устойчивому полярону. На рисунке а) заданы значения $\omega = 0.2$, $\omega' = 0.5$, на рисунке б) значения $\omega = 0.2$, $\omega' = 0.2$.

Ширина распределения по сайтам предшествующего возбуждения в примерах на рис. 9,а и рис. 9,б по-прежнему примерно равна величине максимальной блоховской амплитуды для $E = 0.018$. Различаются значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к предшествующему возбуждению. На рисунке 9,б коэффициент трения $\omega' = 0.2$, меньше, чем на рис. 9,а — $\omega' = 0.5$. Хорошо видно, что на рис. 9,б при меньшем значении коэффициента трения $\omega' = 0.2$, скорость полярона больше, чем для $\omega' = 0.5$ на рис. 9,а. Кроме того, значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, соответствующие предшествующему возбуждению, зависят прямо пропорционально от значений коэффициента трения: чем меньше значение коэффициента трения, тем меньше значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в предшествующем

возбуждении.

8. Примеры колебательного режима движения полярона в постоянном электрическом поле, в котором существует равномерное движение полярона

В примере на рис. 6 был выбран начальный полярон, максимально близкий к устоявшемуся полярону в цепочке, полярон вида (9) при $\xi = 0.95$. В примере на рис. 8 начальное поляронное состояние было шире устоявшегося полярона, а именно, полярон вида (9) при $\xi = 1.5$. Покажем, что при всех тех же условиях и параметрах, которые были использованы в примерах на рис. 6 и на рис. 8, при том же значении напряжённости электрического поля $E = 0.018$, изменив только форму начального поляронного состояния, мы получим колебательный режим движения полярона.

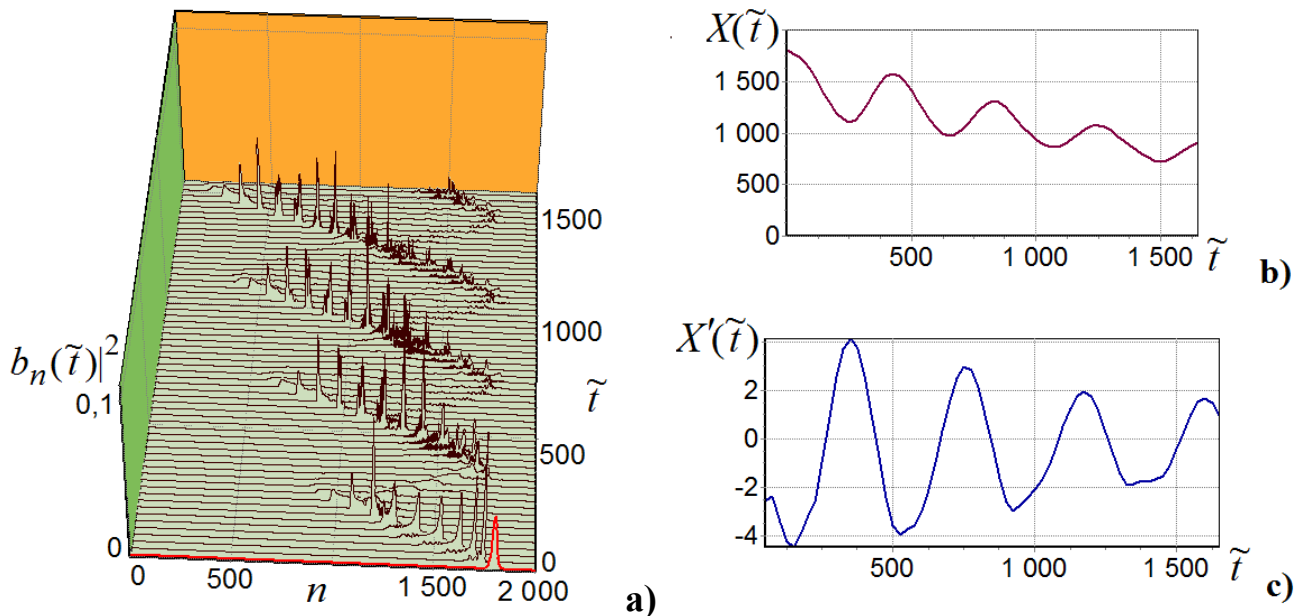


Рис. 10. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, $X(\tilde{t})$, $X'(\tilde{t})$ в процессе колебательного движения полярона в цепочке с параметрами $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$ и длиной $N = 2001$ сайтов. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 1800$. Задано растянутое начальное поляронное состояние в форме обратного гиперболического косинуса вида (9) при $\xi = 6$. Напряжённость электрического поля $E = 0.018$.

В примерах на рис. 10 и на рис. 12 начальное поляронное состояние задано в форме обратного гиперболического косинуса вида (9) при $\xi = 6$. Такой начальный полярон значительно шире устоявшегося полярона в цепочке. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, $X(\tilde{t})$, $X'(\tilde{t})$, показанные для этих двух примеров, наглядно демонстрируют, что начальные поляроны в обоих случаях в начальный момент времени сразу и

целиком перемещаются по цепочке в направлении поля. За половину времени первого блоховского периода заряды перемещаются примерно на расстояние одной максимальной блоховской амплитуды, за вторую половину первого блоховского периода заряды перемещаются в начальное положение. Все представленные графики указывают на колебательный режим движения заряда по цепочке. Напомним, что для значения напряжённости электрического поля $E = 0.018$ период блоховских осцилляций $T_{BL} = 2\pi/E \approx 349$. Максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} = 4\eta/E \approx 533$, максимальная скорость $V_{BL} = 2\eta = 4.8$. Представленные на рис. 10 и рис. 12 графики показывают, что основные характеристики блоховских осцилляций приблизительно соблюдаются.

На рисунке 11 показаны графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $u_n(\tilde{t})$ того же вычислительного эксперимента, что на рис. 10, изменён масштаб графика функции $|b_n(\tilde{t})|^2$. На график выведены только те значения функции $|b_n(\tilde{t})|^2$, которые меньше величины $5 \cdot 10^{-5}$, и значения функций $u_n(\tilde{t})$, для которых выполняется соотношение $|u_n(\tilde{t})| < 5 \cdot 10^{-5}$. На данных графиках представлены примерно два блоховских периода. Как было показано на рис. 10, в начальный момент времени полярон целиком перемещается по цепочке в направлении поля на расстояние одной максимальной блоховской амплитуды за половину первого блоховского периода. В течение второй половины и первого и второго показанных блоховских периодов поляроны перемещаются в начальное положение. При мгновенном включении поля за половину первого блоховского периода в случае колебательного движения полярона на ширину примерно одной максимальной блоховской амплитуды полярон перемещается практически целиком, в случае равномерного движения полярона, на то же расстояние по цепочке смещается начальное малоамплитудное возбуждение полярона.

На рисунке 6,d во второй половине первого блоховского периода мы наблюдаем уже два малоамплитудных возбуждения и равномерно движущуюся главную часть полярона. В этом случае, при возвратном движении начального малоамплитудного возбуждения, остаются ненулевыми значения амплитуд вероятностей $|b_n(\tilde{t})|^2$ и значения смещений сайтов $u_n(\tilde{t})$, соответствующие всем сайтам максимальной блоховской амплитуды. На рис. 10,a, рис. 11,a, рис. 11,b хорошо видно, что и при сильном увеличении выводимых значений функций, при возвратном движении, причём разваливающегося полярона, наблюдаются нулевые значения амплитуд вероятностей $|b_n(\tilde{t})|^2$ и нулевые значения смещений сайтов $u_n(\tilde{t})$ на освобождающихся сайтах. То есть никакого дополнительного, пусть и самого малоамплитудного, возбуждения не возникает.

Следовательно, формирование предшествующего малоамплитудного возбуждения при равномерном движении полярона по цепочке обусловлено наличием в цепочке главной части равномерно движущегося полярона, почти сохранившего свою первоначальную форму.

Показанные на рис. 10 и рис. 12 примеры различаются только значениями параметров ω и ω' . Длина цепочек тоже различается, но это не влияет на характер

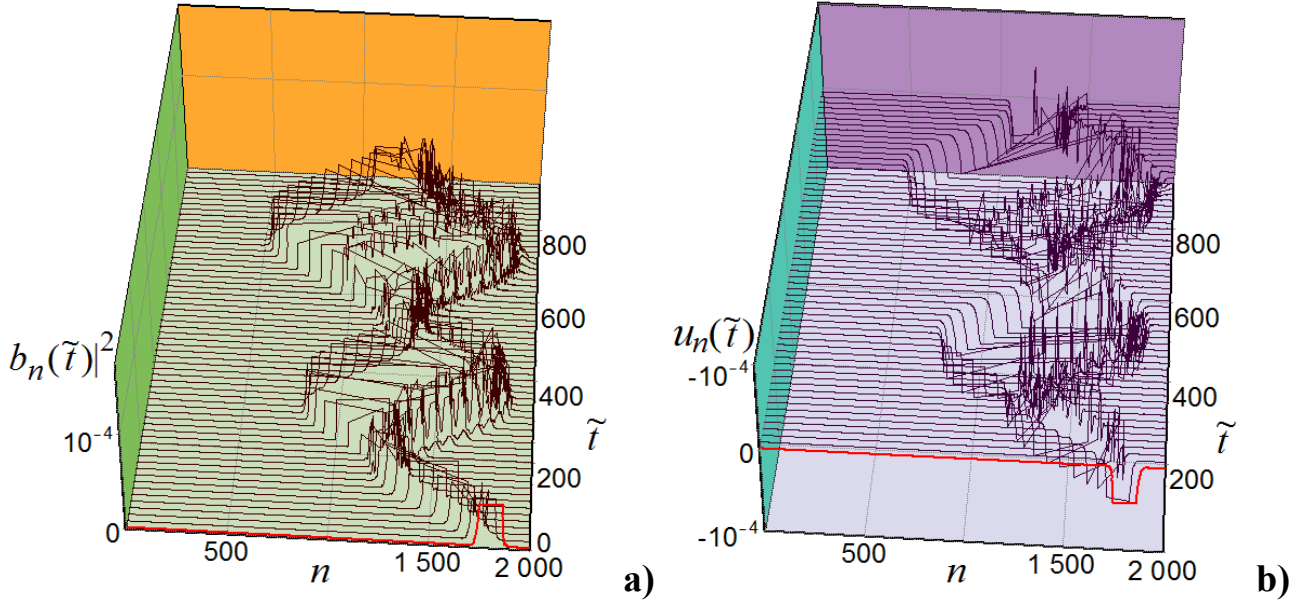


Рис. 11. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $u_n(\tilde{t})$ в процессе колебательного движения полярона в цепочке с параметрами $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$ и длиной $N = 2001$ сайтов. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 1800$. Задано растянутое начальное поляронное состояние в форме обратного гиперболического косинуса вида (9) при $\xi = 6$. Напряжённость электрического поля $E = 0.018$.

движения заряда по цепочке.

При больших значениях параметров $\omega = 1, \omega' = 1$ и широком начальном поляроне вида (9) при $\xi = 6$ наблюдается увеличение периода блоховских осцилляций (см. рис. 10). График функции $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 10,а показывает, что начальный широкий полярон быстро разваливается и двигается по цепочке в направлении поля, совершая осцилляции. Период этих осцилляций примерно равен $T_{pol} \approx 428$. Расстояние по сайтам, которое проходит заряд за первую половину начального колебательного периода, тоже немного больше максимальной блоховской амплитуды.

В примере на рис. 12 задан такой же широкий начальный полярон, как и на рис. 10, но выбраны маленькие значения параметров $\omega = 0.01, \omega' = 0.006$. При этих параметрах заряд сразу начинает совершать колебательные движения по цепочке, хорошо сохраняя свою первоначальную форму. При этом все блоховские характеристики выполняются практически точно для заданного значения напряжённости электрического поля $E = 0.018$. Даже максимальная скорость в процессе блоховских осцилляций очень близка к теоретической: $V_{pol} \approx 4.77, V_{BL} = 2\eta = 4.8$.

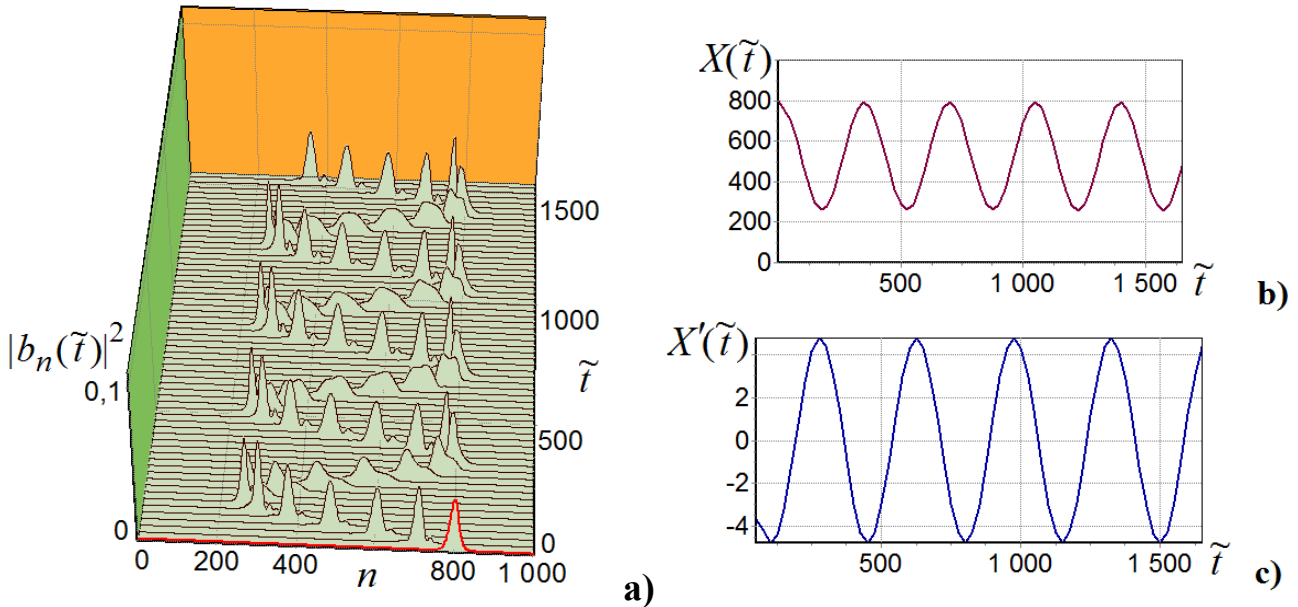


Рис. 12. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, $X(\tilde{t})$, $X'(\tilde{t})$ в процессе колебательного движения полярона в цепочке с параметрами $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$ и длиной $N = 1001$ сайтов. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 800$. Задано растянутое начальное поляронное состояние в форме обратного гиперболического косинуса вида (9) при $\xi = 6$. Напряжённость электрического поля $E = 0.018$.

9. Заключение

Проведённые вычисления показали, что элементы блоховских осцилляций появляются и при стационарном движении полярона по цепочке. Показано, что при стационарном движении полярона по цепочке в постоянном электрическом поле графики функций $X(\tilde{t})$, описывающие положение центра масс полярона, демонстрирует линейную зависимость от \tilde{t} при достаточно больших значениях параметров ω и ω' , например при $\omega = 1$, $\omega' = 1$. При этом производная функции $X(\tilde{t})$ совершает очень незначительные по амплитуде осцилляции с блоховским периодом. При маленьких значениях параметров ω и ω' , например при $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$, небольшие по амплитуде осцилляции с блоховским периодом заметны на графике функции $X(\tilde{t})$, при этом максимум полярона движется строго по направлению поля, не совершая заметных осцилляций, так же, как и при больших значениях параметров ω и ω' .

Для запуска равномерного движения полярона по цепочке можно выбрать начальную форму полярона вида (9), близкую к форме устоявшегося полярона, немного шире или немного уже устоявшегося полярона, пока изменения формы начального поляронного состояния не переведут движение полярона в колебательный режим.

Показано, что форма полярона при стационарном движении в постоянном электрическом поле принимает явно выраженную структуру по направлению поля:

- 1 – начальное возбуждение, сохраняющее своё положение в цепочке,
- 2 – участок с почти нулевыми значениями функций $|b_n(\tilde{t})|^2$,
- 3 – собственно полярон, близкий по форме к начальному,
- 4 – впереди идущее предшествующее возбуждение.

На рисунке 6,d хорошо видно, как за первую половину первого блоховского периода перед поляроном выходит малоамплитудное возбуждение. Но в течение второй половины первого блоховского периода назад возвращается 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 главной частью полярона со скоростью главной части 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.

Начальное возбуждение находится на сайтах цепочки, расположенных от положения центра начального полярона в сторону по направлению поля. Ширина распределения по сайтам начального возбуждения примерно равна одной максимальной блоховской амплитуде. В начальный момент времени ширина начального возбуждения может незначительно увеличиваться при изменении формы начального поляронного состояния или при уменьшении параметров ω и ω' . При уменьшении значений параметров ω и ω' , значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к начальному возбуждению, увеличиваются, см. рис. 6 и рис. 9. Предшествующее возбуждение тоже зависит от значений параметров ω и ω' . Значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, соответствующие предшествующему возбуждению, зависят прямо пропорционально от значений коэффициента трения: чем меньше значение коэффициента трения, тем меньше значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в предшествующем возбуждении, см. рис. 9. Со временем начальное возбуждение немного растекается, но сохраняет своё положение в цепочке в пределах одной максимальной блоховской амплитуды, около центра начального полярона. С самого начала движения начальное возбуждение совершает осцилляции, период которых близок к периоду блоховских осцилляций для заданной напряжённости электрического поля.

Максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на сайтах, где находятся начальное и предшествующее возбуждения, прямо пропорциональны значению напряженности электрического поля и отличаются друг от друга по величине на несколько порядков, в зависимости от параметров цепочки. При изменении формы начального поляронного состояния заметно меняются значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к начальному возбуждению, см. рис. 8 и рис. 6. Те же графики показывают, что возбуждение, предшествующее полярону, никак не изменилось при изменении начального поляронного состояния. Причём не изменились не только значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к предшествующему возбуждению, но не изменилась и ширина распределения по сайтам этого возбуждения, равная

максимальной блоховской амплитуде. То есть, предшествующее возбуждение зависит более от значения напряжённости электрического поля, чем от формы начального поляронного состояния.

Из проведённых вычислений следует, что в процессе равномерного движения полярона по цепочке графики функций $u_n(\tilde{t})$, показывающие смещения сайтов цепочки, соответствуют функциям распределения вероятностей $|b_n(\tilde{t})|^2$. Таким образом, малоамплитудные возбуждения наблюдаются и в смещениях сайтов цепочки, см. рис. 7,b и рис. 6,d.

Ранее, в работе [29], было показано, что в процессе стационарного движения по цепочке в постоянном электрическом поле полярон испытывает колебания Пайерлса – Набарро, обусловленные дискретностью цепочки. В данной работе показано, что в процессе стационарного движения полярона по цепочке полярон испытывает не только колебания Пайерлса – Набарро, но и небольшие осцилляции с блоховским периодом. Проведённые вычисления показали, что элементы блоховских осцилляций появляются и при стационарном движении полярона по цепочке. 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.

Библиографический список

1. T. Holstein. 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
2. T. Holstein. 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
3. D. Hennig, E.B. Starikov, J.F.R. Archilla, F. Palmero. Charge Transport in Poly(dG)–Poly(dC) and Poly(dA)–Poly(dT) DNA Polymers. *Journal of Biological Physics.* 2004. V. 30. №3. P. 227. <https://doi.org/10.1023/B:JOBP.0000046721.92623.a9>
4. E.B. Starikov, J.P. Lewis, O.F. Sankey. Base sequence effects on charge carrier generation in DNA: a theoretical study. *International Journal of Modern Physics B.* 2005. V. 19. №29. P. 4331–4357. DOI: 10.1142/S0217979205032802
5. A.S. Davydov. Solitons in Molecular systems. Reidel Publ. Comp., Boston, USA, 1985. P. 413.
6. A.C. Scott. Davydov’s soliton. *Phys. Rep.* 1992. V. 217. N 1. P. 1–67. [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(92\)90093-F](https://doi.org/10.1016/0370-1573(92)90093-F)

7. P.J. De Pablo et. al. Absence of dc-Conductivity in λ -DNA. *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 85. P. 4992–4995. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.85.4992>
8. D. Porath, A. Bezryadin, S. De Vries, C. Dekker. Direct measurement of electrical transport through DNA molecules. *Nature.* 2000. V. 403. P. 635–638. <https://doi.org/10.1038/35001029>
9. K.-H. Yoo, D.H. Ha, J.-O. Lee, J. W. Park, Jinhee Kim, J.J. Kim, H.-Y. Lee, T. Kawai, and Han Yong Choi. Electrical Conduction through Poly(dA)-Poly(dT) and Poly(dG)-Poly(dC) DNA Molecules. *Phys. Rev. Lett.* 2001. V. 87. P. 198102. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.198102>
10. A.Y. Kasumov et. al. Proximity-Induced Superconductivity in DNA. *Science.* 2001. V. 291. I. 5502. P. 280–282. DOI: 10.1126/science.291.5502.280
11. A. Chepeliaskii et. al. Conduction of DNA molecules attached to a disconnected array of metallic Ga nanoparticles. *New J. Phys.* 2011. V. 13. P. 063046. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/13/6/063046>
12. D. Porath, G. Cuniberti, R. Di Felice. Charge transport in DNA-based devices. *Top. Curr. Chem.* 2004. V. 237. P. 183–227. <http://dx.doi.org/10.1007/b94477>
13. R.G. Eudres, D.L. Cox, R.R.P. Singh. Colloquium: The quest for high-conductance DNA. *Rev. Mod. Phys.* 2004. V. 76. P. 195–214. <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.76.195>
14. V.D. Lakhno. DNA nanobioelectronics. *Int. Quantum. Chem.* 2008. V. 108. P. 1970–1981. <http://dx.doi.org/10.1002/qua.21717>
15. Nanobioelectronics - for Electronics, Biology and Medicine. Eds. Offenhausser A. Rinald R. N. Y.: Springer. 2009.
16. M.Taniguchi, T.Kawai. DNA electronics. *Physica E.* 2006. V. 33. P. 1–12. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2006.01.005>
17. E.M. Conwell, S.V.Rakhmanova. Polarons in DNA. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2000. V. 97. P. 4556–4560. <https://doi.org/10.1073/pnas.050074497>
18. P. Maniadis, G. Kalosakas, K.Ø. Rasmussen, and A.R. Bishop. Polaron normal modes in the Peyrard-Bishop-Holstein model. *Phys. Rev. B.* 2003. V. 68. P. 174304. DOI: 10.1103/PhysRevB.68.174304
19. Т.Ю. Астахова, Г.А. Виноградов. 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

20. V.D. Lakhno. Soliton-like Solutions and Electron Transfer in DNA. *J. Biol. Phys.* 2000. V. 26. P. 133–147. <https://doi.org/10.1023/A:1005275211233>
21. V.D. Lakhno, A.N. Korshunova. Bloch oscillations of a soliton in a molecular chain. *Eur. Phys. J. B.* 2007. V. 55. 85–87. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2007-00045-3>
22. А.Н. Коршунова, В.Д. Лахно. 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
23. V.D. Lakhno. Davydov's solitons in a homogeneous nucleotide chain. *Int. J. Quant. Chem.* 2010. Vol. 110. P. 127–137. <https://doi.org/10.1002/qua.22264>
24. A.N. Korshunova, V.D. Lakhno. Simulation of the Stationary and Nonstationary Charge Transfer Conditions in a Uniform Holstein Chain Placed in Constant Electric Field. *Technical Physics.* 2018, Vol. 63. №9. P. 1270–1276. DOI: 10.1134/S1063784218090086
25. A.A. Voityuk, N. Rösch, M. Bixon, J. Jortner. Electronic Coupling for Charge Transfer and Transport in DNA. *J. Phys. Chem. B.* 2000. V. 104. I. 41. P. 9740–9745. <https://doi.org/10.1021/jp001109w>
26. J. Jortner, M. Bixon, A.A. Voityuk, N. Rösch. *J. Phys. Chem. A.* Superexchange Mediated Charge Hopping in DNA. 2002. V. 106. P. 7599–7606. DOI: 10.1021/jp014232b
27. V.D. Lakhno, A.N. Korshunova. Formation of stationary electronic states in finite homogeneous molecular chains. *Mathematical biology and bioinformatics.* 2010. Vol. 5. I. 1. P. 1–29. doi: 10.17537/2010.5.1
28. A.N. Korshunova, V.D. Lakhno. 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
29. V.D. Lakhno, A.N. Korshunova. 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

Оглавление

1	Введение	3
2	Динамическая модель дискретной холстейновской цепочки	4
3	Начальные данные	5
4	Блоховские осцилляции полярона в процессе колебательного режима движения в сильном электрическом поле	7
5	Колебания Пайерлса – Набарро в процессе равномерного движения полярона по цепочке в постоянном электрическом поле	9
6	Элементы блоховских осцилляций полярона в процессе равномерного движения полярона по цепочке в постоянном электрическом поле	11
7	Формирование структуры полярона в начальный период времени после включения поля в процессе равномерного движения полярона по цепочке в постоянном электрическом поле	16
8	Примеры колебательного режима движения полярона в постоянном электрическом поле, в котором существует равномерное движение полярона	22
9	Заключение.	25
	Библиографический список	27