



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

А.Н. Коршунова, В.Д. Лахно

Низкоплотные составляющие холстейновского полярона при его равномерном движении в постоянном электрическом поле в начальный период времени

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Коршунова А.Н., Лахно В.Д. Низкоплотные составляющие холстейновского полярона при его равномерном движении в постоянном электрическом поле в начальный период времени // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 78. 19 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2022-78>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2022-78>

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

**Низкоплотные составляющие
холстейновского полярона
при его равномерном движении
в постоянном электрическом поле
в начальный период времени**

Москва — 2022

А.Н. Коршунова, В.Д. Лахно

Низкоплотные составляющие холстейновского полярона при его равномерном движении в постоянном электрическом поле в начальный период времени

В данной работе рассматривается образование низкоплотных составляющих полярона при его равномерном движении в полинуклеотидной цепочке во внешнем электрическом поле. Проведенные вычисления показали, что блоховские осцилляции, обычно наблюдаемые в процессе колебательного режима движения полярона по цепочке, не исчезают полностью при переходе к режиму равномерного движения полярона по цепочке. Показано, что после включения электрического поля формируются низкоплотные составляющие полярона, имеющие свою внутреннюю динамику. И несмотря на то, что макрочасть полярона двигается с постоянной скоростью, сохраняя свою форму, низкоплотные составляющие полярона демонстрируют такие характеристики блоховских осцилляций, как период блоховских осцилляций и максимальная блоховская амплитуда.

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

A.N. Korshunova, V.D. Lakhno

Low-density components of a Holstein polaron during its uniform motion in a constant electric field in the initial period of time

In this paper, we consider the formation of low-density components of a polaron during its uniform motion in a polynucleotide chain subjected to a constant electric field. The calculations performed show that Bloch oscillations, usually observed during the oscillatory regime of polaron motion along the chain, do not completely disappear when the polaron motion along the chain becomes uniform. It is shown that after the electric field is turned on, the low-density components of the polaron, which have their own internal dynamics, are formed. And despite the fact that the macro-part of the polaron moves at a constant velocity, retaining its shape, the low-density components of the polaron demonstrate such characteristics of Bloch oscillations as the period of Bloch oscillations and the maximum Bloch amplitude.

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

Авторы выражают благодарность МСЦ РАН за предоставленные вычислительные ресурсы.

1. Введение

В представленной работе проведено исследование стационарного режима движения полярона в молекулярной цепочке в начальный период времени. Проведено сравнение характера блоховских осцилляций полярона в стационарном и колебательном режимах движения. 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] – [14], что связано главным образом с возможностью использования одномерных молекулярных цепочек в качестве нанопроводов в нанобиоэлектронных устройствах [15] – [20]. Причем во многих работах полярон считается основным носителем тока в синтетических полинуклеотидных последовательностях [21] – [27].

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 решетки в цепочке. Показано также [30], что, изменяя только начальное распределение заряда и величину напряженности электрического поля, можно наблюдать самые разнообразные режимы движения и распределения заряда в цепочке. Возможность равномерного движения заряда в однородной холстейновской цепочке в постоянном электрическом поле на очень большие расстояния была показана в работе [30]. Также в работе [30] было показано хорошее соответствие теоретической [29] и численной зависимостей скорости движения заряда с постоянной скоростью от напряженности электрического поля.

Равномерное движение полярона по цепочке возможно для небольших значений напряженности электрического поля, с увеличением значения напряженности электрического поля заряд переходит в колебательный режим движения с блоховскими осцилляциями. В зависимости от выбранных параметров цепочки, в процессе блоховских осцилляций полярон может некоторое время сохранять свою форму [28]. В других случаях начальный полярон может быстро развалиться, и далее заряд движется по цепочке в направлении поля, совершая блоховские осцилляции.

Ранее, в работе [35], 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.

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 характера распределения заряда по цепочке в процессе этого движения. Подбор параметров системы для каждого конкретного случая осуществляется не только в результате проведенных численных исследований, но и в соответствии с полученными результатами аналитического исследования системы в континуальном пределе [29].

В данной работе показано, что при равномерном движении полярона, сразу после мгновенного включения постоянного электрического поля, форма распределения электронной плотности в поляроне принимает явно выраженную структуру. Возникают низкоплотные составляющие полярона, со своей внутренней динамикой, отличной от динамики макро-части полярона. Одну из них мы назвали осциллирующей составляющей, другую – предшествующей. В процессе равномерного движения полярона по цепочке сохраняется форма макро-части полярона. При этом низкоплотные составляющие полярона демонстрируют такие характеристики блоховских осцилляций, как период блоховских осцилляций и максимальная блоховская амплитуда. Осциллирующая низкоплотная составляющая полярона совершает колебания с периодом, близким к теоретическому периоду блоховских осцилляций для заданного значения напряжённости электрического поля. Максимальная блоховская амплитуда проявляется в том, что ширина распределения по сайтам низкоплотных составляющих полярона – осциллирующей и предшествующей – примерно равна одной максимальной блоховской амплитуде, соответствующей заданному значению напряжённости электрического поля.

2. Математическая модель

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 [27]. 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]:

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

где 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} – напряженность электрического поля.

Уравнения движения для гамильтониана \hat{H} приводят к следующей системе

дифференциальных уравнений:

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

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

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

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

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

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

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 – напряженность 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 методом Рунге – Кутты 4-го порядка. Расчеты выполнялись с использованием вычислительных средств МСЦ РАН.

3. Начальные данные

В данной работе 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. Устоявшимся мы называем полярон, который не смещается из своего положения в цепочке и не меняет своей формы при отсутствии электрического поля или дополнительных возбуждений в цепочке. Для поляронов большого радиуса, для которых $d(\tilde{t}) > 15$, полярон вида (7) очень близок к устоявшемуся полярону, 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 приближенным 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 рис. 1 показаны графики функций $|b_n(0)|^2$ и $u_n(0)$ вида (9) при $\xi = 0.95$ и $\xi = 1.5$. Графики функций $|b_n(0)|^2$ и $u_n(0)$ вида (9) при $\xi = 0.95$ практически

совпадают с соответствующими функциями устоявшегося полярона в заданной цепочке, поэтому вполне можно сказать, что на рис. 1 при $\xi = 0.95$ показаны графики функций вероятностей и смещений для устоявшегося полярона.

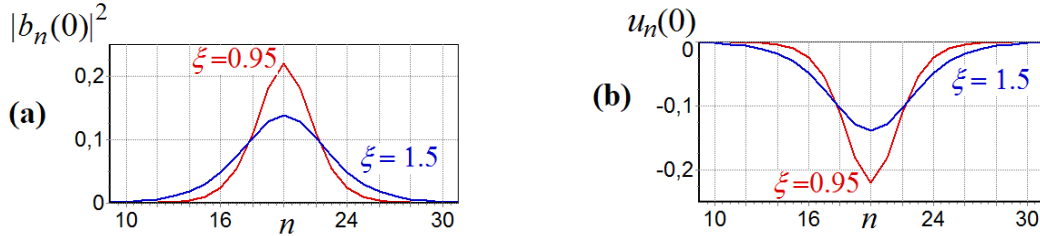


Рис. 1. Графики функций $|b_n(0)|^2$ и $u_n(0)$ для полярона вида (9) при $\xi = 0.95$ и $\xi = 1.5$ в центре цепочки длиной $N = 41$ сайт.

Значения параметров цепочки: $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1$.

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 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 в конце вычислений полярон не подошел слишком близко к концу цепочки. Поле включается "мгновенно" в начальный момент времени.

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

В работе [28] 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 . 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. При этом 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 $V_{BL} = 2\eta$.

Рис. 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 напряженности электрического поля $E = 0.1$ мы

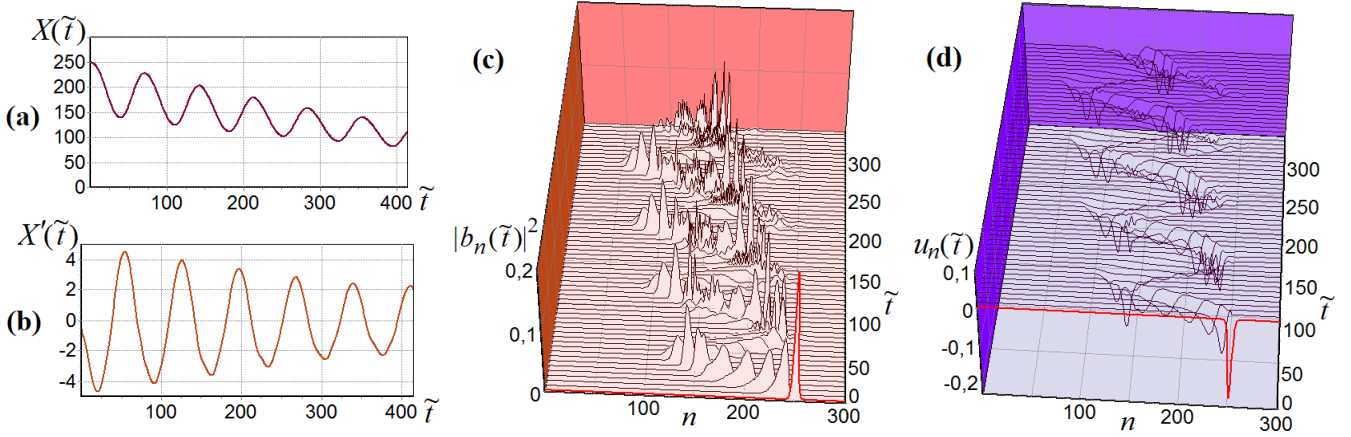


Рис. 2. Эволюция полярона в постоянном электрическом поле напряженностью $E = 0.1$ в цепочке с параметрами $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$ и длиной $N = 301$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 250$. На графике (a) представлена функция $X(\tilde{t})$, на графике (b) представлена ее производная – функция $X'(\tilde{t})$. График (c) демонстрирует динамику амплитуд вероятностей локализации заряда на n -ом сайте – функцию $|b_n(\tilde{t})|^2$. На графике (d) показаны смещения сайтов цепочки в процессе движения полярона – функция $u_n(\tilde{t})$.

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 полюрону в цепочке, который представлен на рис. 1. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 250$.

На рис. 2,а представлены графики функции

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

описывающие движение центра масс частицы. На рис. 2,б показан график производной функции $X(\tilde{t})$ – график функции $X'(\tilde{t})$. 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. Графики функций $X(\tilde{t})$ и $|b_n(\tilde{t})|^2$, представленные на рис. 2,а и рис. 2,с соответственно, 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, совершая блоховские осцилляции.

Максимальная скорость заряда в процессе блоховских осцилляций в

показанном примере $V_{BL} \approx 4.7$ (см. рис. 2,b) совсем немного отличается от теоретической $V_{BL} = 2\eta = 4.8$, чего не будет наблюдаться при равномерном движении полярона по цепочке. На рис. 2,d представлены графики функции $u_n(\tilde{t})$, которая описывает смещения сайтов цепочки при движении полярона. Рис. 2,c и 2,d наглядно демонстрируют, что смещения сайтов цепочки соответствуют вероятностям распределения заряда по цепочке. Заметим, что такое хорошее соответствие графиков функций $u_n(\tilde{t})$ и $|b_n(\tilde{t})|^2$ наблюдается при больших значениях параметров $\omega = 1$ и $\omega' = 1$. При маленьких значениях ω и ω' параметров такого хорошего соответствия указанных графиков не наблюдается.

5. Элементы блоховских осцилляций полярона в процессе его равномерного движения по цепочке в постоянном электрическом поле

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

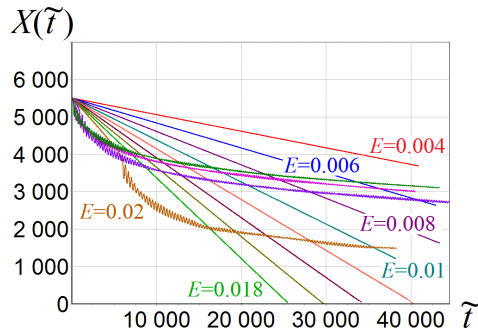


Рис. 3. Движение полярона в постоянном электрическом поле при различных значениях напряжённости поля. Представлены графики функции $X(\tilde{t})$ для $E = 0.004$ (верхний график), $0.006, \dots, 0.026$. Равномерное движение полярона наблюдается при $E = 0.004, 0.006, \dots, 0.018$. Значения параметров 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.

Представленные на рис. 3 графики функции $X(\tilde{t})$ демонстрируют линейную зависимость от \tilde{t} для значений напряженности электрического поля $E = 0.004, E = 0.006, \dots, E = 0.018$. При напряжённости электрического поля $E = 0.02, E = 0.022, E = 0.024, E = 0.026$ заряд переходит в колебательный режим движения. Максимальное время вычислений для показанных графиков превышает безразмерное время $\tilde{t} = 40000$. Для каждого графика функции $X(\tilde{t})$ на

рис. 3 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, по крайней мере в показанные промежутки времени.

Рассмотрим подробнее распределение по цепочке начального полярона в процессе его равномерного движения в электрическом поле напряжённостью $E = 0.018$. Рис. 3 показывает, что при выбранном значении напряжённости электрического поля продолжительность существования равномерного движения $\tilde{t} > 25000$.

Рис. 4 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 $E = 0.018$. 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 $n_0 = 900$.

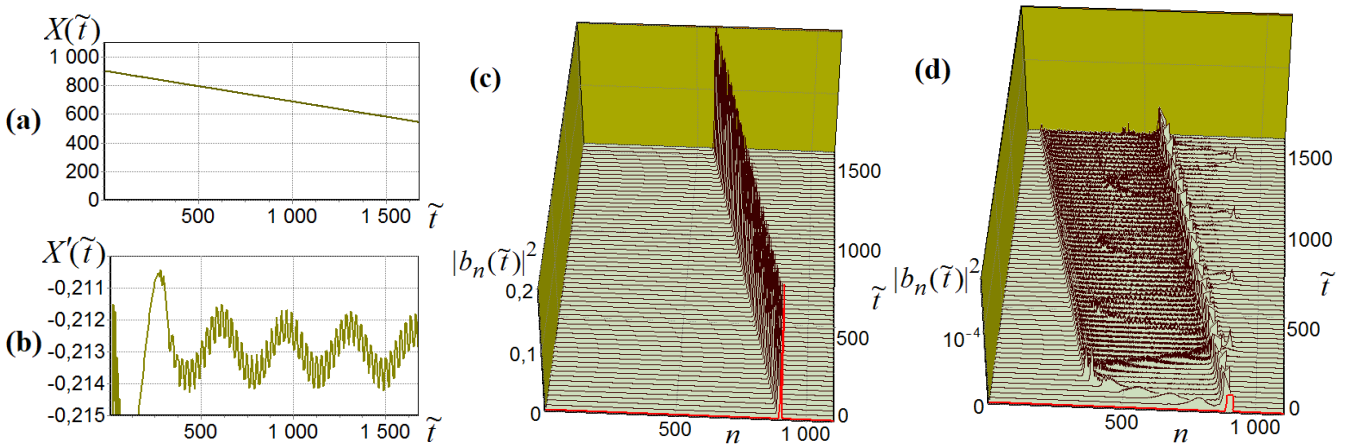


Рис. 4. Равномерное движение полярона в постоянном электрическом поле напряжённостью $E = 0.018$. Графики функций $X(\tilde{t})$, $X'(\tilde{t})$, $|b_n(\tilde{t})|^2$ в процессе движения полярона в цепочке с параметрами $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$ и длиной $N = 1101$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 900$. Задано начальное поляронное состояние вида (9) при $\xi = 0.95$.

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. 4 графики демонстрируют, что основные характеристики блоховских осцилляций приблизительно соблюдаются. График функции $X'(\tilde{t})$ на рис. 4,b демонстрирует период блоховских осцилляций, примерно равный теоретическому периоду $T_{BL} \approx 349$. При этом графики функций $X(\tilde{t})$ на рис. 4,a и $|b_n(\tilde{t})|^2$ на

рис. 4,с указывают на равномерное движение полярона по цепочке. Амплитуда колебаний функции $X'(\tilde{t})$ очень маленькая, её значения изменяются в пределах от $X'(\tilde{t}) \approx -0.212$ до $X'(\tilde{t}) \approx -0.214$. Вид более мелких осцилляций $X'(\tilde{t})$ на рис. 4,б обусловлен дискретностью вывода функции на график и главным образом близостью расположения заряда к концу цепочки. При изменении этих условий построения графика функции $X'(\tilde{t})$ изменяется только вид самых мелких осцилляций, например, при более частом выводе значений $X'(\tilde{t})$ мелкие осцилляции сливаются (в масштабе графика на рис. 4,б) и график $X'(\tilde{t})$ выглядит сплошной линией. При этом более крупные осцилляции с блоховским периодом полностью соответствуют осцилляциям на рис. 4,б.

На рис. 4,d показан тот же график функции $|b_n(\tilde{t})|^2$, что и на рис. 4,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. 4,d как бы обрезаны для того, чтобы были видны низкоплотные составляющие полярона, а именно, очень маленькие ненулевые значения функции $|b_n(\tilde{t})|^2$.

График функции $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 4,d показывает, что в самый начальный период времени, примерно равный половине блоховского периода, за безразмерное время $\tilde{t} \approx 175 \approx 349/2$, низкоплотная составляющая полярона выдвигается перед макрочастью полярона по направлению движения полярона на ширину по сайтам, примерно равную максимальной блоховской амплитуде $A_{BL} \approx 533$. В течение второй половины блоховского периода от начала движения эта вышедшая перед поляроном часть возвращается к начальному положению центра полярона. За этот первый блоховский период центр полярона прошел несколько сайтов, и, так как мы обрезали большую 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 эта низкоплотная составляющая полярона совершает колебания с блоховским периодом, находясь на сайтах цепочки, расположенных от центра начального полярона в сторону по направлению поля на ширину примерно одной максимальной блоховской амплитуды.

На рис. 4,d хорошо видно, как за первую половину первого блоховского периода перед поляроном выходит составляющая часть полярона, имеющая очень маленькие значения электронной плотности. Но в течение второй половины первого блоховского периода эта вышедшая составляющая полярона назад возвращается не полностью. То есть во второй половине первого блоховского периода мы наблюдаем уже две низкоплотные составляющие полярона. Одна часть – осциллирующая составляющая низкой плотности. Другая составляющая движется перед поляроном, со скоростью полярона, имеет постоянную ширину распределения по сайтам,

примерно равную максимальной блоховской амплитуде для заданного значения электрического поля. Никаких осцилляций во второй составляющей полярона не наблюдается. Мы назвали эту составляющую полярона предшествующей. Очевидно, что предшествующая составляющая полярона формируется за счет нахождения в цепочке полярона, сохраняющего свою форму.

Графики функций $u_n(\tilde{t})$ на рис. 5 показывают смещения сайтов цепочки в том же вычислительном эксперименте, который представлен на рис. 4. На рис.5,a графики функций $u_n(\tilde{t})$ показаны в их полном масштабе. На рис.5,b, по аналогии с рис. 4,d, показаны обрезанные графики функций $u_n(\tilde{t})$. Нижняя метка на левой шкале равна -10^{-4} .

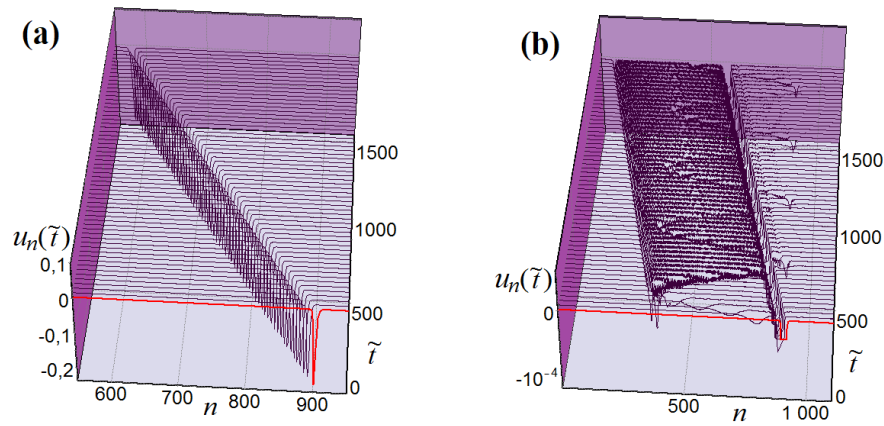


Рис. 5. Графики функций $u_n(\tilde{t})$ в процессе равномерного движения полярона в цепочке с параметрами $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$ и длиной $N = 1101$ сайтов.

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

Из представленных на рис. 5 графиков функций $u_n(\tilde{t})$ следует, что смещения сайтов соответствуют представленным на рис. 4 функциям распределения вероятностей $|b_n(\tilde{t})|^2$. Такое хорошее соответствие смещений сайтов $u_n(\tilde{t})$ и функций распределения вероятностей $|b_n(\tilde{t})|^2$ наблюдается при больших значениях частоты колебаний сайтов цепочки $\omega = 1$ и большом значении коэффициента трения $\omega' = 1$. При маленьких значениях указанных параметров, например при $\omega = 0.01, \omega' = 0.006$, которые соответствуют параметрам цепочки ДНК, вид графиков функций $u_n(\tilde{t})$ и $|b_n(\tilde{t})|^2$ несколько отличаются друг от друга. Таким образом, при равномерном движении полярона по цепочке низкоплотные составляющие полярона формируют смещения сайтов цепочки, вид которых зависит от параметров цепочки.

Пример, представленный на рис. 6, отличается от примера на рис. 4 только формой начального поляронного состояния. На рис. 4 выбрано начальное поляронное состояние, максимально близкое 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 примере на рис. 6 выбрано растянутое начальное поляронное состояние, шире устоявшегося полярона: начальные значения $|b_n(0)|$ заданы в форме обратного гиперболического косинуса вида (9) при $\xi = 1.5$. Все остальные условия и параметры цепочки в примерах на рис. 4 и рис. 6 одинаковые.

График функции $X(\tilde{t})$, представленный на рис. 4,а, полностью совпадает с тем же графиком на рис. 6,а. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $u_n(\tilde{t})$ в полном масштабе для этого случая не представлены, так как они полностью совпадают с теми же графиками на рис. 4,с и на рис. 5,а.

На рис. 6 графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $u_n(\tilde{t})$ обрезаны аналогично графикам на рис. 4,д и на рис. 5,б. Таким образом, на графиках рис. 6 можно видеть и положение максимума движущегося полярона, и низкоплотные составляющие полярона.

Представленные на рис. 6 графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $u_n(\tilde{t})$ показывают, что предшествующая низкоплотная составляющая полярона практически не изменилась при изменении начального поляронного состояния. Следовательно, предшествующая низкоплотная составляющая полярона зависит более от значения напряжённости электрического поля, чем от формы начального поляронного состояния. Причём не изменились не только ширина распределения по сайтам предшествующей части полярона, равная максимальной блоховской амплитуде, но и значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к этой части полярона.

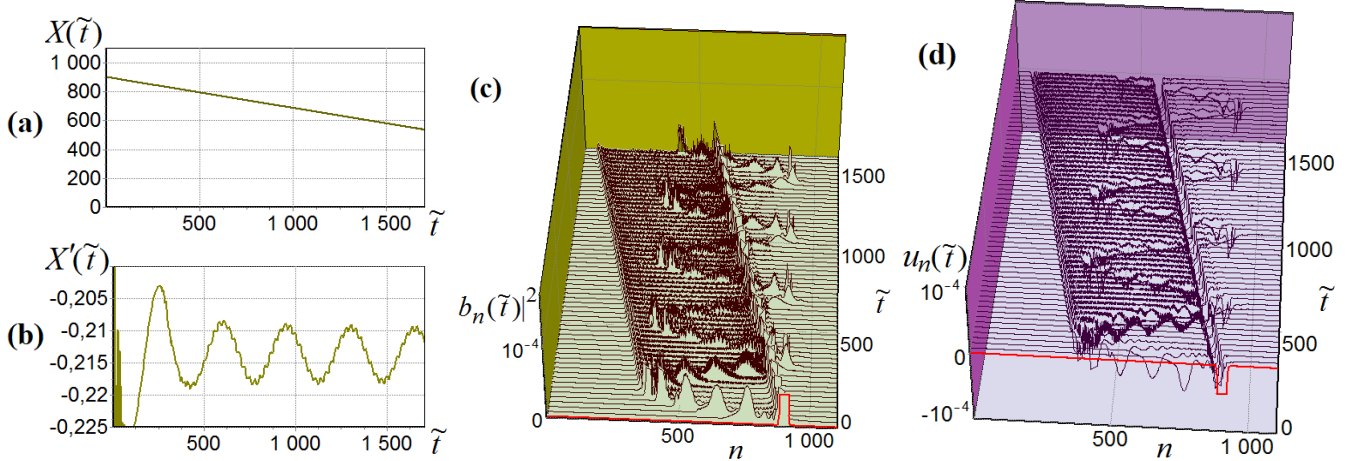


Рис. 6. Равномерное движение полярона в постоянном электрическом поле напряжённостью $E = 0.018$. Графики функций $X(\tilde{t})$, $X'(\tilde{t})$, $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $u_n(\tilde{t})$ в процессе движения полярона в цепочке с параметрами

$\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$ и длиной $N = 1101$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 900$.

Задано растянутое начальное поляронное состояние вида (9) при $\xi = 1.5$.

При сравнении графиков функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 6,с и на рис. 4,д и графиков функций $u_n(\tilde{t})$ на рис. 6,д и на рис. 5,б хорошо видно, что существенно изменилась осциллирующая низкоплотная составляющая полярона. Заметно увеличились значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ и $u_n(\tilde{t})$, относящиеся к области распределения этой

части полярона. Вследствие этого увеличилась (в пять раз) и амплитуда колебаний функции $X'(\tilde{t})$ для начального поляронного состояния вида (9) при $\xi = 1.5$, см. рис. 4,b и рис. 6,b.

Расположение осциллирующей низкоплотной составляющей полярона в пределах максимальной блоховской амплитуды практически одинаковое в примерах на рис. 4,d и на рис. 6,c. В представленных примерах эта часть полярона совершает осцилляции с периодом, близким к периоду блоховских осцилляций для напряжённости электрического поля $E = 0.018$.

6. Заключение

Проведенные вычисления показали, что элементы блоховских осцилляций наблюдаются 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, демонстрируют 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' .

Показано, что при равномерном движении полярона по цепочке в начальный период времени формируются две низкоплотные составляющие полярона: осциллирующая составляющая, сохраняющая свое положение в цепочке, и идущая перед собственно поляроном предшествующая составляющая.

Осциллирующая составляющая располагается между сайтом, на котором находится центр начального полярона, и сайтом, который отстоит от начального положения на величину максимальной блоховской амплитуды в сторону по направлению поля. Ширина распределения по сайтам осциллирующей составляющей примерно равна одной максимальной блоховской амплитуде. В начальный момент времени ширина осциллирующей составляющей 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 осциллирующей составляющей, увеличиваются. Со временем осциллирующая составляющая немного растекается, но сохраняет свое положение в цепочке в пределах примерно одной максимальной блоховской амплитуды. С самого начала движения осциллирующая составляющая совершает колебания, период которых близок к периоду блоховских осцилляций для заданной напряжённости электрического поля.

Предшествующая низкоплотная составляющая полярона тоже зависит от значений параметров ω и ω' . Значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, соответствующие предшествующей составляющей, зависят прямо пропорционально от значений коэффициента трения: чем меньше значение коэффициента трения, тем меньше значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ относящиеся к предшествующей составляющей.

Моделирование равномерного движения полярона по цепочке при различных значениях напряжённости электрического поля показывает, что ширина распределения по сайтам низкоплотных составляющих полярона – осциллирующей и предшествующей – примерно равна одной максимальной блоховской амплитуде, соответствующей заданному значению напряжённости электрического поля. Период колебаний осциллирующей составляющей сохраняется в течение всего времени моделирования равномерного движения полярона и примерно равен периоду блоховских осцилляций для заданного значения напряжённости электрического поля.

В данной работе мы рассмотрели формирование низкоплотных составляющих полярона в начальный период движения. Более длительные вычисления показывают, что макрочасть полярона проходит область расположения осциллирующей составляющей полярона и двигается дальше по цепочке в направлении поля вместе с предшествующей составляющей. Между макрочастью полярона и остающейся на месте осциллирующей составляющей наблюдается область ненулевых значений распределения электронной плотности, эти значения тоже очень маленькие. Таким образом, макрочасть полярона вместе с предшествующей составляющей удаляются от осциллирующей составляющей полярона. Продолжительность этой фазы движения зависит от величины напряжённости электрического поля: чем больше значение напряжённости электрического поля, тем короче продолжительность этого движения. Затем полярон, а именно его макрочасть, начинает медленно разрушаться и, потеряв свою форму, переходит в колебательный режим движения с блоховскими осцилляциями. В процессе колебательного режима движения заряда низкоплотных составляющих полярона, конечно же, не наблюдается, поскольку нет и самого 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. [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(59\)90002-8](https://doi.org/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. [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(59\)90003-X](https://doi.org/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. Zhongkai Huang, Masayuki Hoshina, Hajime Ishihara, and Yang Zhao. Transient dynamics of super Bloch oscillations of a one dimensional Holstein polaron under the influence of an external AC electric field. *Annalen der Physik.* 2017. V. 529. 1600367. <https://doi.org/10.1002/andp.201600367>
5. D. Hennig, A. D. Burbanks, and A. H. Osbaldestin, Directed current in the Holstein system. *Phys. Rev. E.* 2011. V. 83. 031121. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.83.031121>
6. L.V. Yakushevich, V.N. Balashova, F.K. Zakiryanov. On the DNA Kink Motion Under the Action of Constant Torque. *Math. Biol. Bioinf.*. 2016. V. 11. №1. P. 81–90. <https://doi.org/10.17537/2016.11.81>
7. 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. <https://doi.org/10.1142/S0217979205032802>
8. A.S. Davydov. Solitons in Molecular systems. Reidel Publ. Comp., Boston, USA, 1985. P. 413.
9. 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)
10. 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>
11. 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>
12. 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>

13. A.Y. Kasumov et. al. Proximity-Induced Superconductivity in DNA. *Science*. 2001. V. 291. I. 5502. P. 280–282. <https://doi.org/10.1126/science.291.5502.280>
14. 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>
15. 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>
16. A. P. Chetverikov, W. Ebeling, V. D. Lakhno, and M. G. Velarde. Discrete-breather-assisted charge transport along DNA-like molecular wires. *Phys. Rev. E*. 2019. V. 100. 052203. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.052203>
17. 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>
18. V.D. Lakhno. DNA nanobioelectronics. *Int. Quantum. Chem.* 2008. V. 108. P. 1970–1981. <http://dx.doi.org/10.1002/qua.21717>
19. Nanobioelectronics - for Electronics, Biology and Medicine. Eds. Offenhausser A. Rinald R. N. Y.: Springer. 2009.
20. M.Taniguchi, T.Kawai. DNA electronics. *Physica E*. 2006. V. 33. P. 1–12. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2006.01.005>
21. 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>
22. Nikolaos K. Voulgarakis. The effect of thermal fluctuations on Holstein polaron dynamics in electric Field. *Physica B*. 2017 V. 519. P. 15–20. <http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2017.04.030>
23. N.S. Fialko, V.D. Lakhno, Dynamics of Large Radius Polaron in a Model Polynucleotide Chain with Random Perturbations. *Math. Biol. Bioinf.*. 2019. V. 14. №2. P.406–419. <https://doi.org/10.17537/2019.14.406>
24. M. A. Fuentes, P. Maniadis, G. Kalosakas, Rasmussen, A. R. Bishop, V. M. Kenkre, and Yu. B. Gaididei. Multi-peaked polarons in soft potentials. *Phys. Rev. E*. 2004. V. 70. 025601(R). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.70.025601>
25. 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. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.174304>

26. T.Yu. Astakhova, G.A. Vinogradov. Polaron in Electric Field and Vibrational Spectrum of Polyacetylene. *Math. Biol. Bioinf.* 2019. V. 14. №1. P. 150–159. Published in Russian. <https://doi.org/10.17537/2019.14.150>
27. 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>
28. 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>
29. 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>
30. 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. <https://doi.org/10.1134/S1063784218090086>
31. 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>
32. 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. <https://doi.org/10.1021/jp014232b>
33. 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. <https://doi.org/10.17537/2010.5.1>
34. 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. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2014.02.025>
35. 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. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2010-10565-2>

Оглавление

1	Введение	3
2	Математическая модель	4
3	Начальные данные	6
4	Блоховские осцилляции полярона в процессе его колебательного режима движения в электрическом поле.	7
5	Элементы блоховских осцилляций полярона в процессе его равномерного движения по цепочке в постоянном электрическом поле	9
6	Заключение.	14
	Библиографический список	16