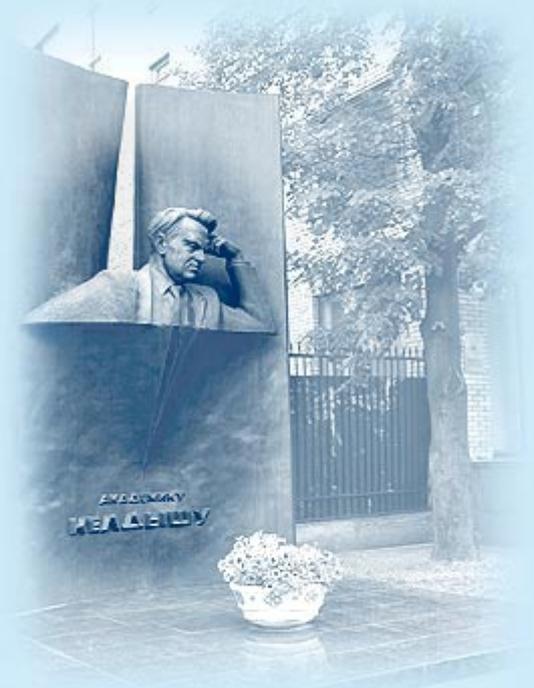




ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 53 за 2023 г.



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

А.Н. Коршунова, В.Д. Лахно

Переход от равномерного
режима движения полярона к
колебательному при
изменении начального
поляронного состояния

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International



Рекомендуемая форма библиографической ссылки

Коршунова А.Н., Лахно В.Д. Переход от равномерного режима движения полярона к колебательному при изменении начального поляронного состояния // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2023. № 53. 26 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2023-53>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2023-53>

Публикации по материалам препринта

Коршунова А.Н., Лахно В.Д. Переход от равномерного режима движения полярона к колебательному при изменении начального поляронного состояния // Математическая биология и биоинформатика, 2023, Т. 18, № 2, с. 446–463
DOI: [10.17537/2023.18.446](https://doi.org/10.17537/2023.18.446)

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

**Переход от равномерного режима
движения полярона к колебательному
при изменении начального
поляронного состояния**

Москва — 2023

А.Н. Коришунова, В.Д. Лахно

Переход от равномерного режима движения полярона к колебательному при изменении начального поляронного состояния

Проведено исследование характера движения холстейновского полярона в однородной полинуклеотидной цепочке в постоянном электрическом поле в зависимости от начального поляронного состояния. Проведённые вычисления показали, что продолжительность равномерного движения полярона по цепочке конечна и зависит от всего множества параметров системы, в том числе от характерного размера начального поляронного состояния. Показано, что при фиксированном значении напряжённости электрического поля, увеличение характерного размера начального поляронного состояния приводит к сокращению времени равномерного движения полярона по цепочке. Показано также, что изменение формы начального поляронного состояния влияет не только на продолжительность равномерного движения полярона по цепочке, но и на характеристики низкоплотных составляющих полярона.

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

A.N. Korshunova, V.D. Lakhno

Transition from a uniform mode of polaron motion to an oscillatory one when the initial polaron state changes

A study of the nature of the motion of a Holstein polaron in a homogeneous polynucleotide chain in a constant electric field, depending on the initial polaron state, was carried out. The calculations performed showed that the duration of the uniform motion of the polaron along the chain is finite and depends on the entire set of system parameters, including the characteristic size of the initial polaron state. It is shown that at a fixed value of the electric field intensity, an increase in the characteristic size of the initial polaron state leads to a decrease in the time of uniform motion of the polaron along the chain. It is also shown that a change in the shape of the initial polaron state exerts influence upon not only the duration of the uniform motion of the polaron along the chain, but also the characteristics of the low-density 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.

1. Введение

Большое количество теоретических [1]–[9] и экспериментальных [10]–[16] работ посвящено изучению механизмов электронного транспорта в ДНК, в том числе есть исследования такого интересного явления, как блоховские осцилляции [17]–[19]. Блоховские осцилляции наблюдаются как в постоянном электрическом поле, так и при одновременном воздействии постоянного и переменного электрических полей [20]–[22]. Практический интерес к явлению блоховских осцилляций обусловлен прежде всего возможностью создания с их использованием элементов наноэлектронных устройств, в том числе источников и приемников излучения в терагерцовом частотном диапазоне, терагерцового блоховского генератора с частотой, которую можно регулировать электрическим полем.

Проведено численное моделирование движения полярона в однородной дискретной полинуклеотидной цепочке в постоянном электрическом поле. Моделирование движения полярона по цепочке при наличии постоянного электрического поля проведено на основе модели Холстейна [23, 24]. Проведенные ранее исследования показывают, что в рассматриваемой системе могут реализоваться сложные динамические режимы, которые зависят от множества всех выбранных параметров системы. Движение заряда с постоянной скоростью возможно для небольших значений напряжённости электрического поля. С увеличением значения напряжённости электрического поля заряд теряет свою первоначальную форму и переходит в колебательный режим движения с блоховскими осцилляциями.

В работе [25] нами было показано, что блоховские осцилляции, возникающие в процессе колебательного режима движения полярона по цепочке, не исчезают полностью при переходе к режиму равномерного движения полярона по цепочке. При равномерном движении полярона по цепочке также наблюдаются блоховские осцилляции, хотя и в несколько иной форме.

В работах [26] и [27] показано, что для заданного значения напряжённости электрического поля, при фиксированных значениях параметров цепочки, изменяя только начальное распределение заряда в цепочке, можно наблюдать или равномерное движение заряда по цепочке, или колебательный режим движения заряда. В этих работах было показано, что с увеличением характерного размера начального поляронного состояния происходит сокращение продолжительности равномерного движения полярона по цепочке. Но не было показано, почему это происходит, как происходит переход к колебательному режиму движения, что именно влияет на продолжительность равномерного движения полярона. В данной работе показано, что нет никакого критического значения коэффициента растяжения (или сжатия) начального поляронного состояния при котором резко

происходит переход от равномерного к колебательному режиму движения при фиксированном значении напряжённости электрического поля. Показано, что этот переход происходит постепенно при постепенном изменении формы начального поляронного состояния.

В работе [25] было 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, которая двигается с постоянной скоростью. Осциллирующая низкоплотная составляющая полярона совершает колебания с периодом, близким к теоретическому периоду блоховских осцилляций для заданного значения напряжённости электрического поля. Ширина распределения по сайтам низкоплотных составляющих полярона – осциллирующей и предшествующей – примерно равна одной максимальной блоховской амплитуде, соответствующей заданному значению напряжённости электрического поля.

Макрочасть полярона вместе с предшествующей составляющей двигаются в направлении поля и сначала проходят область расположения осциллирующей составляющей полярона, которая сохраняет своё положение в цепочке. Затем макрочасть полярона вместе с идущей перед ней предшествующей составляющей удаляются от осциллирующей составляющей полярона. Между макрочастью полярона и остающейся на месте осциллирующей составляющей наблюдается область ненулевых значений распределения электронной плотности, эти значения тоже очень маленькие.

Проведённые вычисления показали, что при изменении формы начального поляронного состояния изменяются значения функции распределения электронной плотности полярона, особенно относящиеся к осциллирующей низкоплотной составляющей полярона. Увеличение значений функции распределения электронной плотности полярона, относящиеся к области расположения низкоплотных составляющих полярона, приводит к сокращению продолжительности равномерного движения полярона при фиксированном значении напряжённости электрического поля.

2. Математическая модель

Численное моделирование движения заряда в однородной полинуклеотидной цепочке при наличии постоянного электрического поля выполнялось на основе модели Холстейна [23, 24]. В рамках используемой модели ДНК рассматривается как однородная цепочка, составленная из N сайтов. Каждый сайт представляет собой нуклеотидную пару, которая рассматривается как гармонический осциллятор [28]. Движение заряда в постоянном электрическом поле моделируется системой связанных квантово-классических динамических уравнений с диссипацией. Динамика электрона описывается линейным уравнением Шрёдингера, а динамику сайтов с учётом диссипации описывают классические уравнения движения.

Динамика квантовой частицы в классической цепочке описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений, которая в безразмерных переменных имеет вид :

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

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

где b_n – амплитуды вероятности локализации заряда на n -ом сайте, $\sum_n |b_n(\tilde{t})|^2 = 1$, η – матричные элементы перехода по сайтам, ω – частота колебаний n -го сайта, κ – 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).

Уравнения (1) являются уравнениями Шрёдингера для амплитуд вероятностей b_n , описывающими эволюцию частицы в деформируемой цепочке. Уравнения (2) представляют собой классические уравнения движения, описывающие динамику нуклеотидных пар с учетом диссипации. Введенная таким образом модель, описывающая динамику заряженной частицы в полинуклеотидной цепочке, в явном виде учитывает диссипацию в рассматриваемой системе.

Система нелинейных дифференциальных уравнений (1), (2) решается методом Рунге–Кутты 4-го порядка. Расчеты выполнялись с использованием вычислительных средств МСЦ РАН.

В представленной работе мы исследуем движение поляронных состояний в электрическом поле в однородной незамкнутой цепочке, то есть цепочка имеет два конца.

3. Начальные данные

PolyA/PolyT цепочке ДНК с зарядом, движущимся по тиминам, соответствуют следующие значения параметров: $\nu_{TT} = \nu = 0.158eV$, $\alpha = 0.13eV/\text{\AA}$, $\gamma = 6 \cdot 10^{-10}g/sec$, $M = 10^{-21}g$, $k = 0.062eV/\text{\AA}^2$ см. [29, 30]. Им соответствуют следующие значения безразмерных параметров: $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$. Для моделирования движения заряда в электрическом поле были выбраны следующие значения безразмерных параметров: $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, а значения частоты колебаний сайтов ω и коэффициента трения ω' при проведении вычислений задавались как соответствующие параметрам *PolyA/PolyT* цепочки ДНК, так и модельные: $\omega = 1$, $\omega' = 1$.

Начальные значения функции $|b_n(0)|$ задавались в виде растянутого обратного гиперболического косинуса:

$$|b_n(0)| = \frac{\sqrt{2}}{4} \sqrt{\frac{\varkappa}{\xi|\eta|}} \operatorname{ch}^{-1}\left(\frac{\varkappa(n - n_0)}{4\xi|\eta|}\right), \quad (3)$$

где ξ – коэффициент растяжения, с помощью которого мы можем изменять форму начального полярона вида (3) для формирования различных вариантов движения заряда по цепочке. Для цепочки с параметрами $\varkappa = 4$ и $\eta = 2.4$ обратный гиперболический косинус, или начальный полярон вида (3), максимально близок к устоявшемуся полярону при $\xi = 0.95$. В масштабе графика на рис. 1 полярон вида (3) при $\xi = 0.95$ и при $\xi = 1.0$ совпадают, поэтому в дальнейших вычислениях мы будем использовать начальный полярон вида (3) при $\xi = 1.0$ наравне с начальным поляроном вида (3) при $\xi = 0.95$.

На рисунке 1 показаны графики функций $|b_n(0)|^2$ вида (3) при различных значениях коэффициента растяжения ξ .

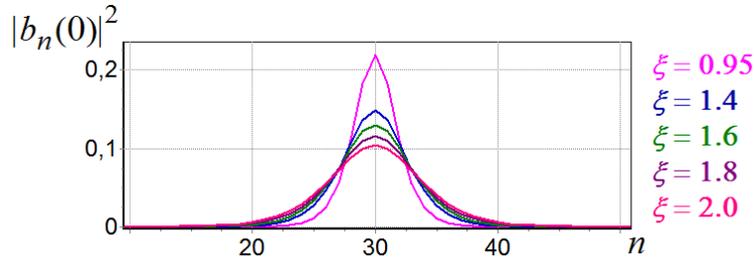


Рис. 1. Графики функций $|b_n(0)|^2$ вида (3) в цепочке длиной $N = 60$ сайтов для различных значений коэффициента растяжения ξ .

В примере на рис. 1, как и в представленных далее примерах, сайты в цепочке пронумерованы слева направо. Значения напряжённости электрического поля мы задаём положительными: $\tilde{E} > 0$, заряды двигаются по

цепочке в направлении поля справа налево, поэтому значения n_0 (положения начального поляронного состояния) задаются вблизи правого конца цепочки.

Таким образом, для моделирования движения полярона в постоянном электрическом поле будем помещать в цепочку начальное поляронное состояние вида (3) 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 и в конце вычислений полярон не подошел слишком близко к концу цепочки. Поле включается "мгновенно" в начальный момент времени.

4. Движение полярона в цепочке ДНК при различных начальных поляронных состояниях

В данном разделе мы рассмотрим движение полярона в *PolyA/PolyT* цепочке ДНК при фиксированном значении напряжённости постоянного электрического поля и при различных начальных поляронных состояниях.

Ранее, в работах [31], [32], [26] 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 или с изменением начального поляронного состояния поля заряд переходит в колебательный режим движения с блоховскими осцилляциями.

В данном примере были выбраны значения безразмерных параметров соответствующие *PolyA/PolyT* цепочке ДНК: $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$. Начальное поляронное состояние задавалось в виде обратного гиперболического косинуса вида (3) при различных значениях коэффициента растяжения ξ . На рисунке 2 представлены графики функции

$$X(\tilde{t}) = \sum_n |b_n(\tilde{t})|^2 \cdot n, \quad (4)$$

описывающие движение центра масс частицы.

Рисунок 2 демонстрирует графики функций $X(\tilde{t})$, которые характеризуют движение и распределение полярона по цепочке в электрическом поле напряжённостью $E = 0.014$. Начальные значения $|b_n(0)|$ были выбраны в форме обратного гиперболического косинуса вида (3) при различных значениях коэффициента растяжения ξ . Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте с номером $n_0 = 1800$ в цепочке длиной

$N = 2001$ сайт. На рис. 2 хорошо видно, что полярон сначала движется с постоянной скоростью, затем полярон, а именно его макрочасть, начинает медленно разрушаться и, потеряв свою форму, переходит в колебательный режим движения.

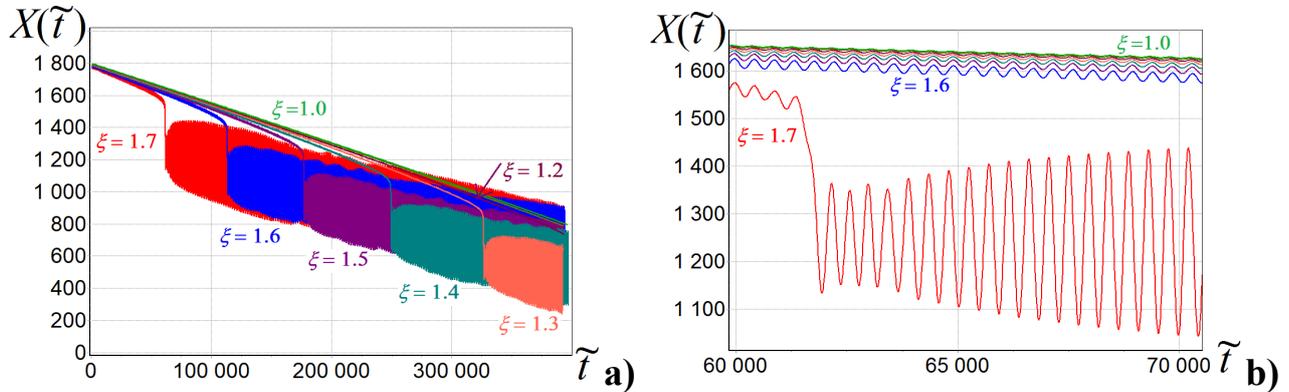


Рис. 2. Движение полярона в постоянном электрическом поле напряженностью $E = 0.014$ в цепочке длиной $N = 2001$ сайт с параметрами $\kappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 1800$. Графики функций $X(\tilde{t})$ демонстрируют движение полярона из различных начальных поляронных состояний вида (3) при различных значениях коэффициента растяжения ξ . Для верхнего графика задано начальное поляронное состояние вида (3) при $\xi = 1.0$. Участок графика а) показан на рисунке б) для демонстрации осцилляций полярона.

Для выбранного значения напряжённости электрического поля $E = 0.014$ существует равномерное движение полярона с сохранением первоначальной формы на большие расстояния. На рисунке 2,а) графики функций $X(\tilde{t})$ для $\xi = 1.0, 1.1, 1.2$ в целом выглядят прямыми линиями в течение всего показанного безразмерного времени вычислений $\tilde{t} = 400000$, что указывает на равномерное движение полярона. Для остальных начальных поляронных состояний вида (3) при значениях коэффициента растяжения $\xi = 1.3, 1.4, 1.5, 1.6, 1.7$ также наблюдаются продолжительные участки равномерного движения.

На протяжении всего времени вычислений графики функций $X(\tilde{t})$ при всех значениях коэффициента растяжения ξ на рис. 2 демонстрируют колебания с одинаковым периодом. Период этих колебаний приблизительно равен периоду блоховских осцилляций $T_{BL} = 2\pi/E$. Для выбранного значения напряженности электрического поля $E = 0.014$ период блоховских осцилляций $T_{BL} \approx 449$.

Максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} = 4\eta/E$, для $E = 0.014$ максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} \approx 686$. Графики функций $X(\tilde{t})$ на рис. 2 приблизительно демонстрируют максимальную блоховскую амплитуду

при переходе от равномерного режима движения к колебательному и в процессе колебательного режима движения. На участках равномерного режима движения поляронов амплитуда колебаний функций $X(\tilde{t})$ на рис. 2 значительно меньше максимальной блоховской амплитуды. Кроме того, в этом случае, амплитуды колебаний функций $X(\tilde{t})$ зависят от начального поляронного состояния вида (3), то есть, от значений коэффициента растяжения ξ . Причём эта амплитуда не изменяется на всём протяжении равномерного движения полярона для каждого отдельного значения ξ . При увеличении ширины начального поляронного состояния, или, другими словами, при увеличении коэффициента растяжения ξ , эта маленькая амплитуда колебаний полярона при его равномерном движении увеличивается.

Для всех графиков функций $X(\tilde{t})$ на рис. 2 продолжительность вычислений на участках равномерного движения полярона превышает десятки и сотни блоховских периодов, соответствующих заданной напряженности электрического поля. Это, несомненно, свидетельствует о том, что для указанных значений напряжённости электрического поля мы действительно наблюдаем равномерное движение полярона по цепочке в показанные промежутки времени.

В работе [25] было показано, что при равномерном движении полярона осциллирующая низкоплотная составляющая полярона совершает колебания с периодом, близким к теоретическому периоду блоховских осцилляций для заданного значения напряжённости электрического поля. При этом при больших значениях частоты колебаний сайтов $\omega = 1$ и коэффициента трения $\omega' = 1$, графики функций $X(\tilde{t})$ выглядят прямыми линиями, только их производные $X'(\tilde{t})$ показывают незначительные колебания с блоховским периодом и очень маленькой амплитудой. Период колебаний осциллирующей низкоплотной составляющей сохраняется в течение всего времени моделирования равномерного движения полярона. В примере на рис. 2 выбраны маленькие значения параметров $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$, которые соответствуют *PolyA/PolyT* цепочке ДНК. При таких значениях $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$ осцилляции функций $X(\tilde{t})$ с блоховским периодом хорошо видны и при равномерном движении полярона и при колебательном. Но при равномерном движении полярона осциллирует только низкоплотная составляющая полярона, и амплитуда колебаний функций $X(\tilde{t})$ в десятки и сотни раз меньше амплитуды блоховских колебаний целого полярона при колебательном режиме движения полярона, см рис. 2, b).

В работе [25] было также показано, что макрочасть полярона проходит область расположения осциллирующей составляющей полярона и двигается дальше по цепочке в направлении поля вместе с предшествующей составляющей. Для выбранного значения напряжённости электрического

поля $E = 0.014$ максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} \approx 686$. Поэтому в примере на рис. 2 макрочасть полярона даже для $\xi = 1$ только начинает отходить от области расположения осциллирующей низкоплотной составляющей полярона, а предшествующая низкоплотная составляющая полярона уже подходит к краю цепочки. И это при больших вычислительных затратах. Поэтому более подробно рассмотрим переход от режима равномерного движения полярона к колебательному при модельных параметрах. В данном примере хорошо видны колебания функции $X(\tilde{t})$ как при равномерном движении полярона, так и при колебательном, кроме того это пример движения полярона в *PolyA/PolyT* цепочке. При модельных параметрах можно показать более наглядно низкоплотные составляющие полярона.

5. Движение полярона в модельной цепочке при различных начальных поляронных состояниях

В этом разделе рассматривается пример движения полярона в модельной полинуклеотидной цепочке при фиксированном значении напряжённости постоянного электрического поля и при различных начальных поляронных состояниях. По сравнению с предыдущим примером изменились только значения частоты колебаний сайтов ω и коэффициента трения ω' : $\omega = 1$, $\omega' = 1$. Значение напряжённости электрического поля не изменилось: $E = 0.014$. Начальное поляронное состояние также задавалось в виде обратного гиперболического косинуса вида (3) при различных значениях коэффициента растяжения ξ .

Движение и распределение полярона по цепочке в электрическом поле напряжённостью $E = 0.014$ представлено графиками функций $X(\tilde{t})$ на рис. 3. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте с номером $n_0 = 6500$ в цепочке длиной $N = 7001$ сайт.

В отличие от примера на рис. 2, при таких больших значениях частоты колебаний сайтов цепочки $\omega = 1$ и коэффициента трения $\omega' = 1$, равномерное движение сохраняется продолжительное время даже при очень больших значениях коэффициента растяжения ξ . В работе [25] было подробно показано формирование низкоплотных составляющих полярона при таких же значениях ω , ω' и устоявшемся начальном поляронном состоянии. То есть при таком начальном состоянии, которое не меняет своей формы и не сдвигается из своего положения при отсутствии электрического поля и внешних возбудений. Для цепочки с безразмерными параметрами $\varkappa = 4$ и $\eta = 2.4$ начальный полярон вида (3), максимально близок к устоявшемуся

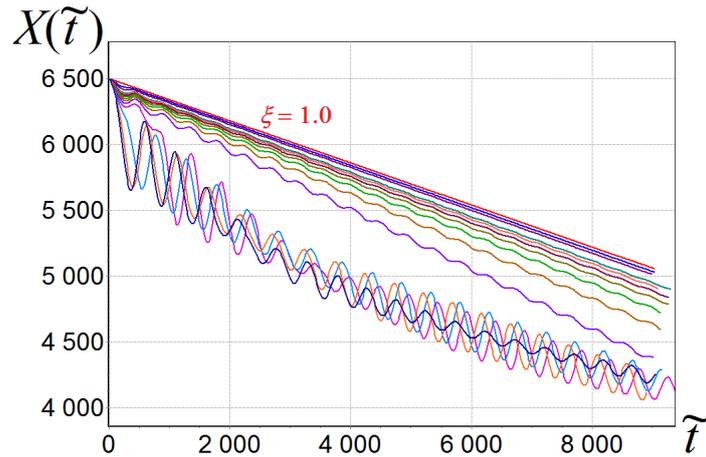


Рис. 3. Движение полярона в постоянном электрическом поле напряженностью $E = 0.014$ в цепочке длиной $N = 7001$ сайт с параметрами $\kappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 6500$. Графики функций $X(\tilde{t})$ демонстрируют движение полярона из начальных поляронных состояний вида (3) при различных значениях коэффициента растяжения ξ . Для верхнего графика задано начальное поляронное состояние вида (3) при $\xi = 1.0$.

полярону при $\xi = 0.95$.

На рисунке 3 три верхних графика функций $X(\tilde{t})$ для $\xi = 1.0, 3.0, 4.0$, в целом выглядят прямыми линиями в течение всего показанного безразмерного времени вычислений $\tilde{t} = 8700$, что указывает на равномерное движение полярона.

На следующих семи графиках, при $\xi = 5.0, 5.2, 5.4, \dots, 6.2$, уже отчетливо видны осцилляции функций $X(\tilde{t})$ с блоховским периодом, $T_{BL} \approx 449$, но с маленькой амплитудой, значительно меньше максимальной блоховской амплитуды для заданного значения напряженности электрического поля $E = 0.014$. Эти семь графиков, несмотря на хорошо заметные осцилляции функций $X(\tilde{t})$, тоже указывают на равномерное движение полярона. В этих случаях полярон, точнее его макрочасть, движется по цепочке с постоянной скоростью сохраняя свою форму в течение всего показанного времени вычислений. Осцилляции функций $X(\tilde{t})$, описывающих движение центра масс частицы, обусловлены осцилляциями низкоплотной составляющей полярона, которую мы назвали осциллирующей составляющей.

Для следующих четырех графиков заданы начальные поляронные состояния вида (3) при $\xi = 6.4, 6.6, 6.8, 7.0$. В этих случаях начальное поляронное состояние быстро теряет свою форму и заряд переходит в колебательный режим движения с блоховским периодом для $E = 0.014$. Но в этих примерах амплитуда колебаний заряда уже соответствует максимальной

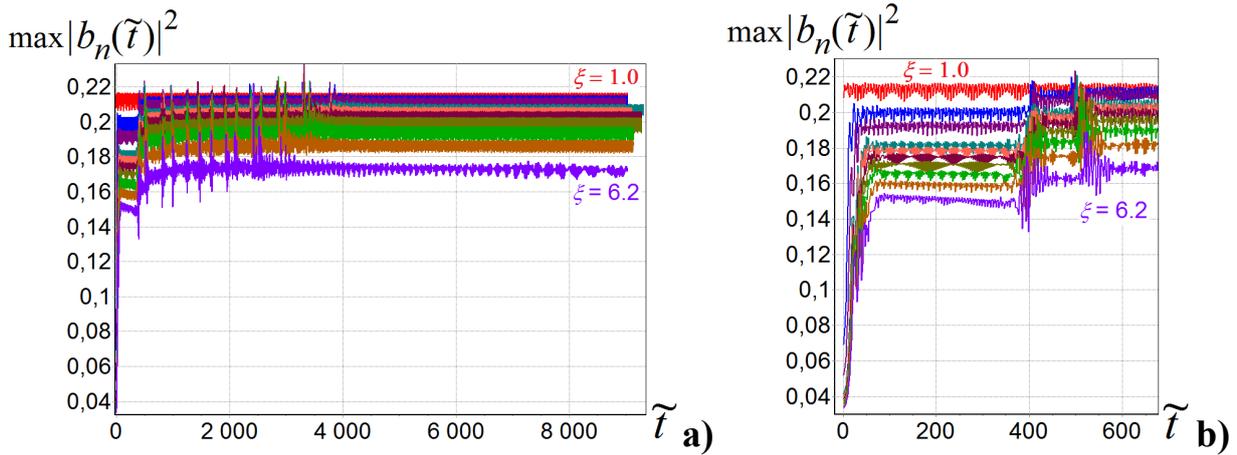


Рис. 4. Максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в процессе движения полярона в постоянном электрическом поле из начальных поляронных состояний вида (3) при следующих значениях коэффициента растяжения ξ : $\xi = 1.0, 3.0, 4.0, 5.0, 5.2, 5.4, 5.6, 5.8, 6.0, 6.2$. Для верхнего графика задано начальное поляронное состояние вида (3) при $\xi = 1.0$. Напряжённость электрического поля $E = 0.014$, длина цепочки $N = 7001$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 6500$. Параметры цепочки: $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$. На рисунке б) показана часть рисунка а) в увеличенном масштабе.

блеховской амплитуде для заданного значения напряженности электрического поля, $A_{BL} \approx 686$.

Графики функций $X(\tilde{t})$ на рис. 3 показывают, что основные характеристики блеховских осцилляций приблизительно соблюдаются.

На рис. 3 и рис. 4 показаны разные функции одного и того же примера. На рис. 4 показаны максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, где $b_n(\tilde{t})$ – амплитуды вероятности локализации заряда на n -м сайте. Другими словами, графики функций на рис. 4 показывают положения пиков поляронов, движущихся из различных начальных поляронных состояний. Графики максимумов функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 4 представлены для тех случаев, когда наблюдается равномерное движение полярона в примере на рис. 3. Рисунок 4 наглядно демонстрирует, что с увеличением значения коэффициента растяжения ξ для начальных поляронных состояний вида (3) уменьшаются максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, то есть пик поляронов становится ниже.

Рис. 4,б) и рис. 5 наглядно показывают, что в начальный момент времени максимум полярона быстро увеличивается. И только для случая начального поляронного состояния при $\xi = 1.0$, близком к устоявшемуся полярону в цепочке, максимум полярона почти не изменяется, см. рис. 4 и рис. 6,а).

Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 5 демонстрируют равномерное

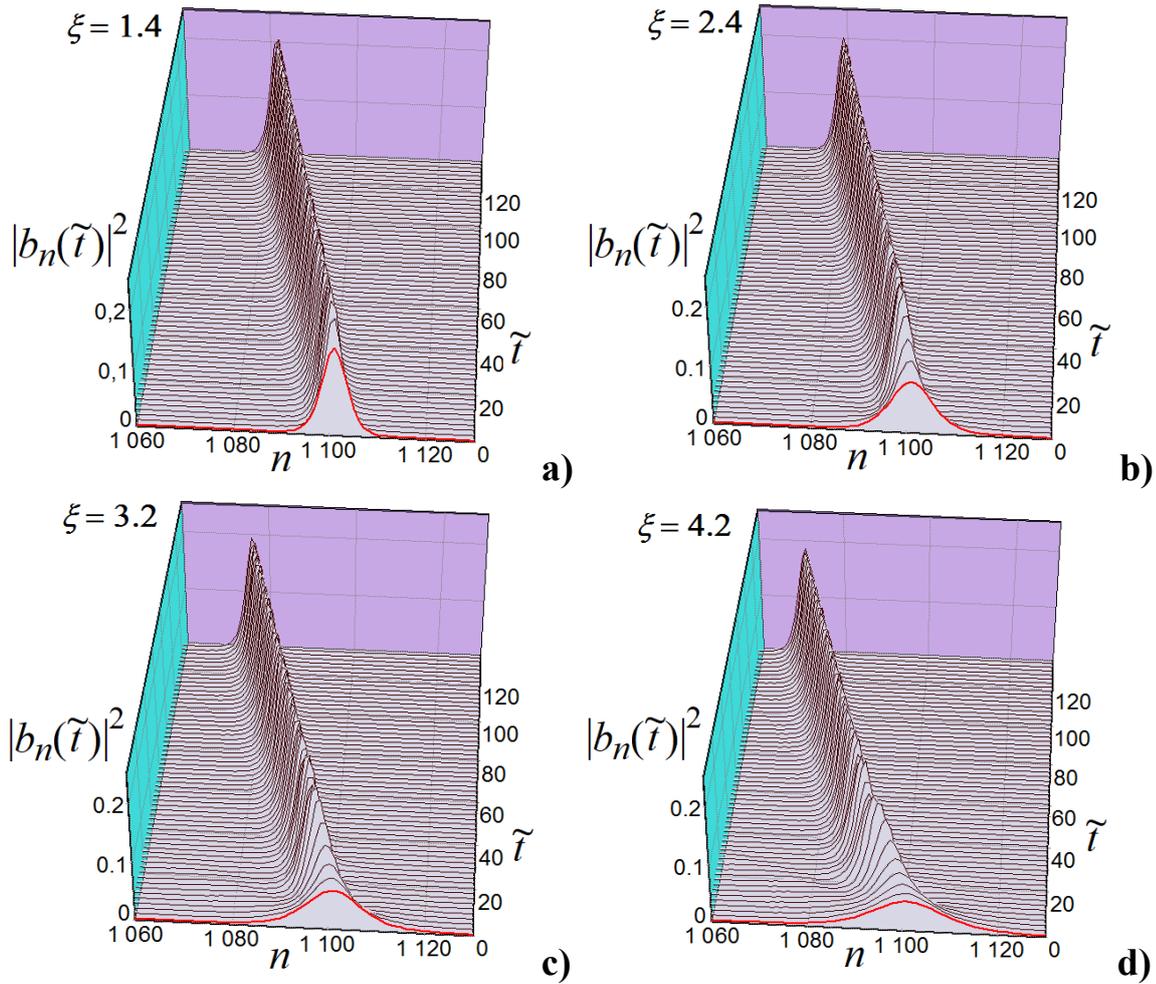


Рис. 5. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в процессе движения полярона из различных начальных поляронных состояний вида (3) при $\xi = 1.4, 2.4, 3.2, 4.2$. Напряжённость электрического поля $E = 0.014$, длина цепочки $N = 1301$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 1100$. Параметры цепочки: $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$.

движение полярона из различных начальных поляронных состояний вида (3) при $\xi = 1.4, 2.4, 3.2, 4.2$. В представленном примере задана длина цепочки $N = 1301$ сайт и напряжённость электрического поля $E = 0.014$. В выбранном на рис. 5 масштабе графиков видны только макрочасти поляронов. Хорошо видно, что из растянутого начального поляронного состояния заряд быстро принимает форму, близкую к форме устоявшегося полярона в цепочке. Но из представленных на рис. 4 графиков максимальных значений функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ следует, что форма поляронов на рис. 5, а), рис. 5, б) и рис. 5, в) немного различается.

В работе [25] было подробно рассмотрено формирование низкоплотных составляющих полярона в начальный момент времени. Было показано, что при

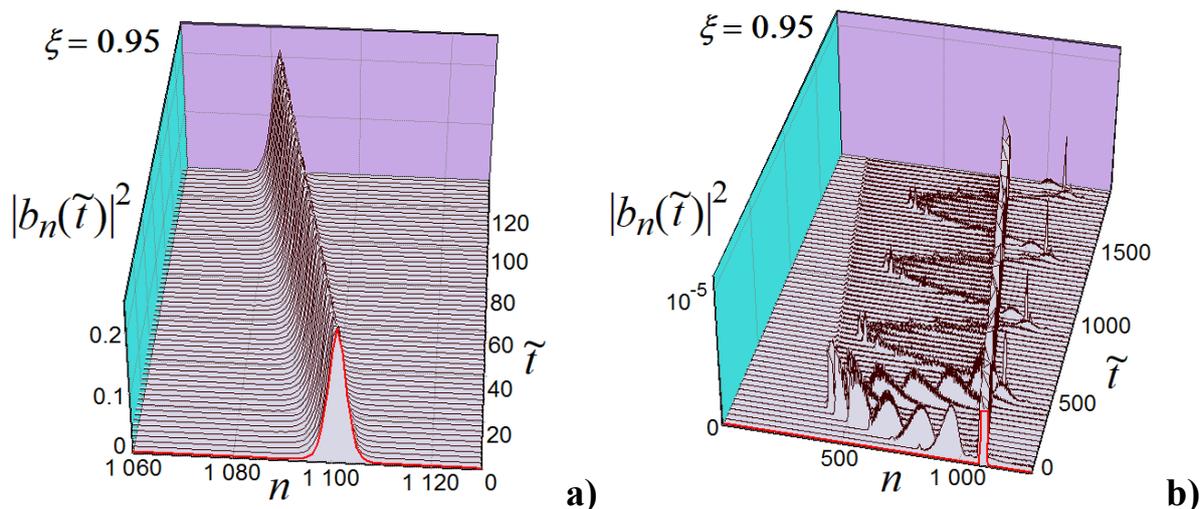


Рис. 6. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в процессе движения полярона из начального поляронного состояния вида (3) при $\xi = 0.95$. Напряжённость электрического поля $E = 0.014$, длина цепочки $N = 1301$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 1100$. Параметры цепочки: $\kappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$.
Графики показаны в различных масштабах левой шкалы.

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

Рисунок 6 демонстрирует графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, которые характеризуют движение и распределение полярона по цепочке в электрическом поле напряженностью $E = 0.014$. Длина цепочки $N = 1301$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 1100$. Начальные значения $|b_n(0)|$ были выбраны в форме обратного гиперболического косинуса вида (3) при $\xi = 0.95$, такой полярон максимально близок к устоявшемуся полярону в цепочке. На рис. 6,а) полярон показан в полном размере. Этот график наглядно демонстрирует равномерное движение полярона по цепочке, хорошо видно, что никаких осцилляций макрочасть полярона не испытывает. На рис. 6,б) график функции $|b_n(\tilde{t})|^2$ показан в масштабе от 0 до 10^{-5} , чтобы видно было осциллирующую и предшествующую низкоплотные составляющие полярона. Кроме того, на график выводятся только те значения функции $|b_n(\tilde{t})|^2$, которые меньше величины $2 \cdot 10^{-6}$. Значения $|b_n(\tilde{t})|^2 > 2 \cdot 10^{-6}$ на рис. 6,б) обрезаны для того, чтобы были видны низкоплотные составляющие полярона, а именно область очень маленьких ненулевых значений функции $|b_n(\tilde{t})|^2$.

Для выбранного значения напряженности электрического поля $E =$

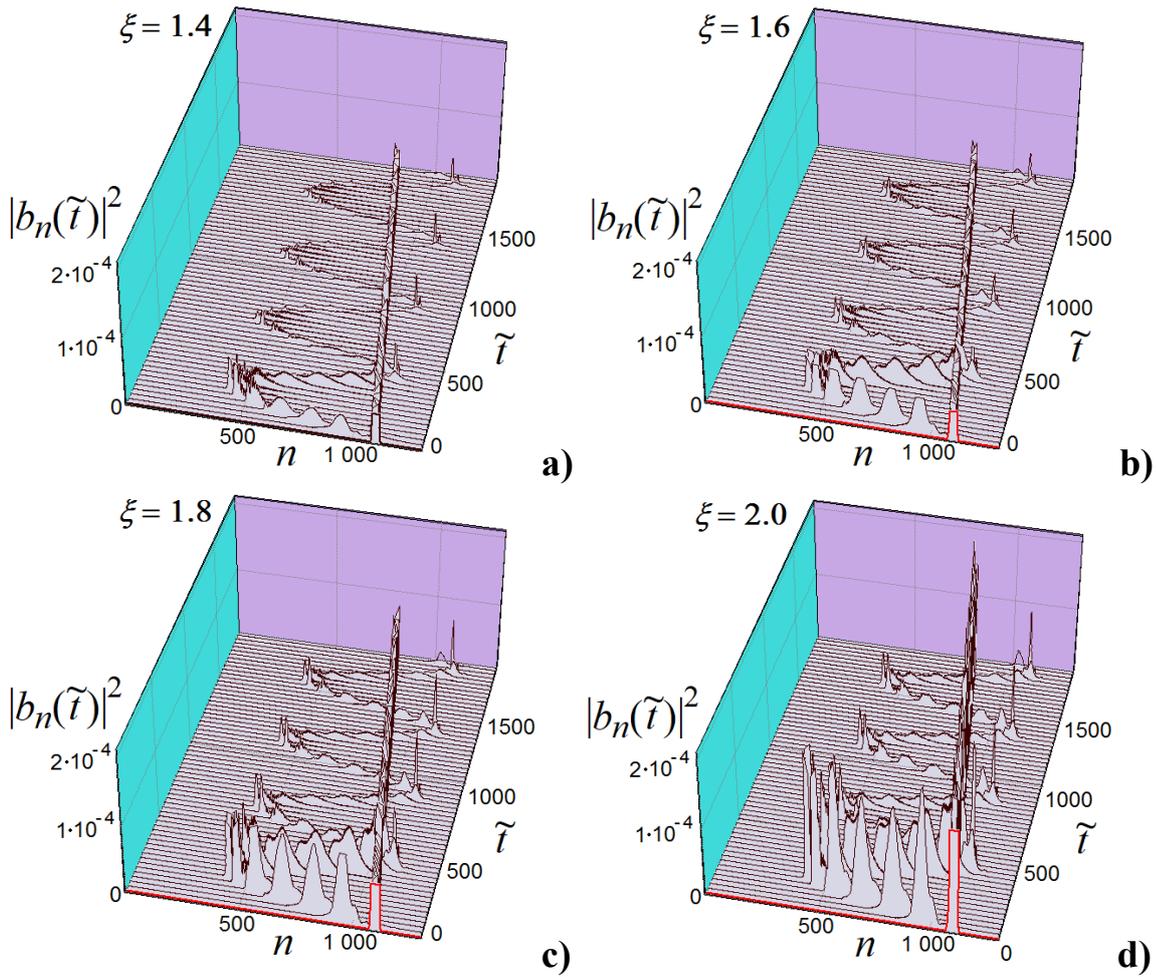


Рис. 7. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в процессе движения полярона из различных начальных поляронных состояний вида (3) при $\xi = 1.4, 1.6, 1.8, 2.0$.

Напряжённость электрического поля $E = 0.014$, длина цепочки $N = 1301$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 1100$. Параметры цепочки: $\kappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 1$, $\omega' = 1$. Показана осциллирующая низкоплотная составляющая полярона.

0.014 период блоховских осцилляций $T_{BL} = 2\pi/E \approx 449$. Максимальная блоховская амплитуда $A_{BL} = 4\eta/E \approx 686$. Представленные на рис. 6,b), графики показывают, что основные характеристики блоховских осцилляций приблизительно соблюдаются.

График функции $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис.6,b) показывает, что ширина распределения по сайтам осциллирующей и предшествующей низкоплотных составляющих полярона примерно равна максимальной блоховской амплитуде для заданного значения напряжённости электрического поля $A_{BL} \approx 686$. Период колебаний осциллирующей составляющей примерно равен периоду блоховских осцилляций $T_{BL} \approx 449$.

Выше мы показали, что с увеличением значения коэффициента

растяжения ξ для начальных поляронных состояний вида (3) уменьшаются максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, то есть макрочасть полярона немного изменяется, причём графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ при равномерном движении полярона из различных начальных состояний практически не различаются. Но с изменением начального поляронного состояния изменяются не только максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, изменяются также низкоплотные составляющие полярона, и эти изменения значительные.

На рис. 7 начальные поляронные состояния заданы в форме обратного гиперболического косинуса вида (3) при $\xi = 1.4, 1.6, 1.8, 2.0$. Во всех показанных на рис. 7 примерах центр полярона в начальный момент времени находится на сайте с номером $n_0 = 1100$ в цепочке длиной $N = 1301$ сайт. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ во всех четырёх примерах показаны в одинаковом масштабе. В выбранном на рис. 7 масштабе видны только осциллирующие низкоплотные составляющие поляронов, предшествующая низкоплотная составляющая поляронов на порядок меньше, поэтому в заданном масштабе левой шкалы не видна. Как и на рис. 6,b), значения $|b_n(\tilde{t})|^2 > 2 \cdot 10^{-5}$ на рис. 7 обрезаны для того, чтобы были видны осциллирующие низкоплотные составляющие поляронов. В полном масштабе графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в данном примере аналогичны графикам $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 5 и демонстрируют равномерное движение полярона.

Представленные на рис. 7 графики показывают, что небольшие изменения начального поляронного состояния приводят к значительному изменению значений функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящихся к осциллирующей низкоплотной составляющей полярона.

6. Распределение электронной плотности полярона в полинуклеотидной цепочке при различных начальных поляронных состояниях

На рис. 5, рис. 6 и рис. 7 показаны низкоплотные составляющие полярона в начальный момент времени, когда макрочасть полярона ещё находится в области расположения осциллирующей низкоплотной составляющей полярона. Далее рассмотрим характер распределения полярона по цепочке на большом времени.

Проведённые вычисления показали, что при изменении формы начального поляронного состояния изменяются значения функции распределения электронной плотности полярона, особенно относящиеся к осциллирующей низкоплотной составляющей полярона. Увеличение значений функции распределения электронной плотности полярона, относящихся к

области расположения низкоплотных составляющих полярона, приводит к сокращению продолжительности равномерного движения полярона при фиксированном значении напряжённости электрического поля.

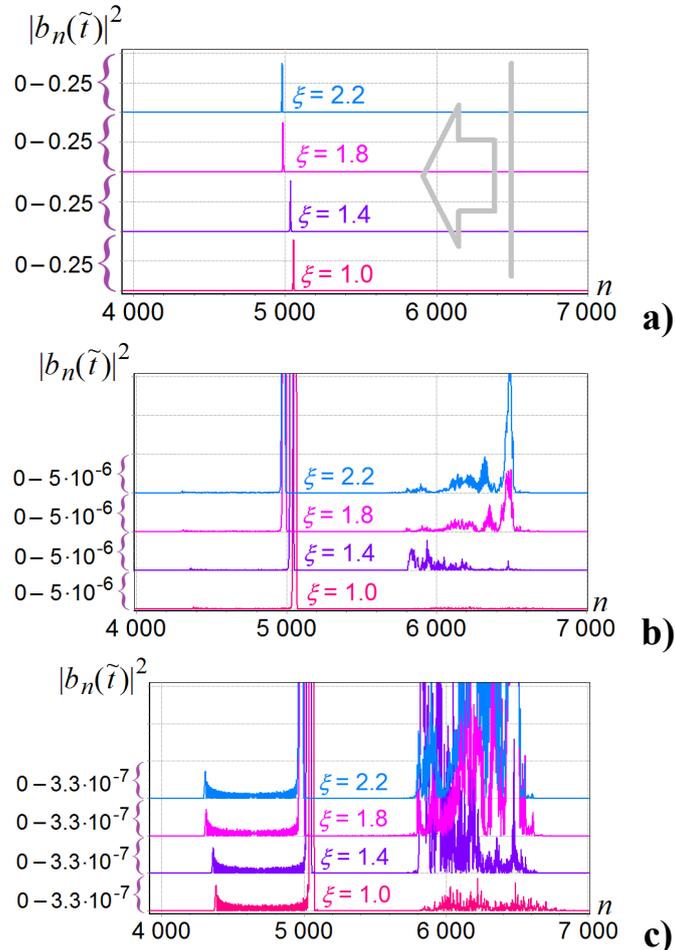


Рис. 8. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в момент безразмерного времени $\tilde{t} \approx 8700$ в процессе движения полярона из начальных поляронных состояний вида (3) при $\xi = 1.0, 1.4, 1.8, 2.2$. Напряжённость электрического поля $E = 0.014$, длина цепочки $N = 7001$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 6500$. Параметры цепочки: $\varkappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$. Графики показаны в различных масштабах левой шкалы.

На рисунке 8 показаны графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ того же примера, что и на рис. 3, рис. 5 и рис. 6, при тех же и при других значениях коэффициента растяжения ξ . Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ показаны в момент безразмерного времени $\tilde{t} \approx 8700$ в различных масштабах для левой шкалы. Графики показаны для начальных поляронных состояний вида (3) при различных значениях коэффициента растяжения ξ , $\xi = 1.0, 1.4, 1.8, 2.2$. 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 $n_0 = 6500$. Длина цепочки $N = 7001$ сайт.

На каждом из трёх рисунков на рис. 8 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 значениях параметров и начальных поляронных состояниях полярон, а именно его макрочасть, движется с постоянной скоростью по направлению поля в цепочке, приблизительно сохраняя свою форму, см. рис. 3, рис. 5 и рис. 6.

Рис. 8,а) показывает графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в полном масштабе, в короткой цепочке эти графики практически совпадают с графиком функций $|b_n(0)|^2$ для $\xi = 0.95$ на рис. 1. На рис. 8,б) показаны те же графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, что и на рис. 8,а), но в масштабе от 0 до $5 \cdot 10^{-6}$ для каждого из четырёх графиков. В выбранном масштабе на 8,б) наблюдаются ненулевые значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на сайтах от 580 до 650 (приблизительно). Это область расположения осциллирующей низкоплотной составляющей полярона. Хорошо видно, что значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, соответствующие осциллирующей низкоплотной составляющей полярона, явно зависят от начального поляронного состояния вида (3) для различных значений коэффициента растяжения ξ . А именно, с увеличением коэффициента растяжения ξ увеличиваются значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к осциллирующей низкоплотной составляющей полярона. Причём в выбранном масштабе левой шкалы осциллирующая низкоплотная составляющая полярона для $\xi = 1$ не видна, как не видны и предшествующие низкоплотные составляющие полярона.

Масштаб левой шкалы на рис. 8,с) для каждого графика задан в интервале от 0.0 до $3.3 \cdot 10^{-7}$. В этом масштабе хорошо видны и осциллирующие и предшествующие низкоплотные составляющие полярона для всех заданных начальных поляронных состояний. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 8,б) и на рис. 8,с) показывают, что ширина распределения по сайтам осциллирующей и предшествующей низкоплотных составляющих полярона примерно равна максимальной блоховской амплитуде для заданного значения напряжённости электрического поля $A_{BL} \approx 686$. И если значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к осциллирующей низкоплотной составляющей полярона, заметно увеличиваются с увеличением коэффициента растяжения ξ , то значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к предшествующей низкоплотной составляющей полярона, выглядят одинаковыми и не демонстрируют явной зависимости от напряжённости электрического поля E .

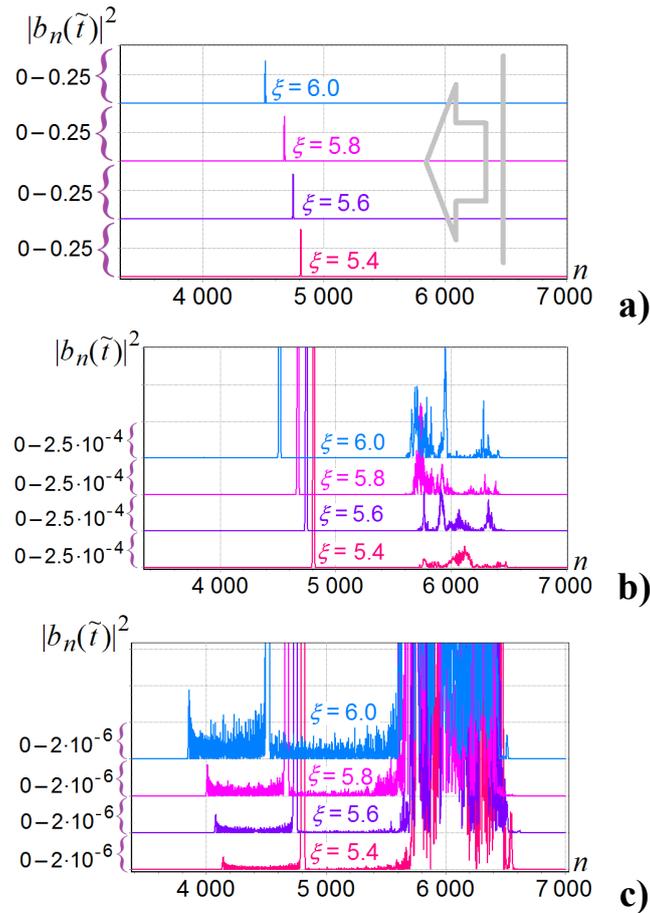


Рис. 9. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ в момент безразмерного времени $\tilde{t} \approx 8700$ в процессе движения полярона из начальных поляронных состояний вида (3) при $\xi = 5.4, 5.6, 5.8, 6.0$. Напряжённость электрического поля $E = 0.014$, длина цепочки $N = 7001$ сайт. Центр полярона в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 6500$. Параметры цепочки: $\kappa = 4, \eta = 2.4, \omega = 1, \omega' = 1$. Графики показаны в различных масштабах левой шкалы.

Проведённые вычисления показали, что для большого диапазона значений коэффициента растяжения ξ , предшествующая низкоплотная составляющая полярона практически не зависит от значений ξ . И только при очень больших значениях ξ , при которых продолжительность равномерного движения резко сокращается с увеличением ξ , наблюдается явная зависимость всех низкоплотных составляющих полярона от ξ , другими словами, от начального поляронного состояния.

На рисунке 9 показаны графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ того же примера, что и на рис. 8, но для больших значений коэффициента растяжения ξ , $\xi = 5.4, 5.6, 5.8, 6.0$. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ показаны в момент безразмерного времени $\tilde{t} \approx 8700$ в различных масштабах для левой

шкалы. 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 $n_0 = 6500$. Длина цепочки $N = 7001$ сайт. Максимальные значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, представленные на рис. 9,а), уменьшаются при увеличении коэффициента растяжения ξ . Как и для небольших значений коэффициента растяжения ξ на рис. 8,б), значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к осциллирующей низкоплотной составляющей полярона на рис. 9,б), увеличиваются при увеличении ξ . Заметим, что значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к низкоплотным составляющим полярона в примерах на рис. 8 и на рис. 9 различаются на один–два порядка. Графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рис. 9,с) показывают, что ширина распределения по сайтам предшествующей низкоплотной составляющей полярона не зависит от ξ и примерно равна максимальной блоховской амплитуде для $E = 0.014$: $A_{BL} \approx 686$. Рис. 9,с) наглядно показывает, что с увеличением ξ увеличиваются не только значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к предшествующей низкоплотной составляющей полярона, но и значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к сайтам между осциллирующей низкоплотной составляющей полярона и макрочастью полярона.

7. Заключение

Показано, что перенос заряда в ДНК радикально зависит от начального распределения заряда в молекуле. Управлять этим начальным распределением можно подбирая параметры контактов, являющихся источником зарядов в ДНК. Другим способом управления эволюцией заряда является задержка во времени включения внешнего электрического поля. В данной работе рассмотрен случай мгновенного включения поля в момент появления заряда в цепочке.

Проведённые ранее исследования показали, что в процессе равномерного движения полярона по цепочке в начальный период времени, сразу после включения постоянного электрического поля, формируются две низкоплотные составляющие полярона: осциллирующая составляющая, сохраняющая свое положение в цепочке, и идущая перед собственно поляроном предшествующая составляющая. Было показано, что ширина распределения по сайтам обеих низкоплотных составляющих полярона 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 напряженности электрического поля. В процессе равномерного движения полярона по цепочке макрочасть полярона двигается с постоянной скоростью и сохраняет свою форму на всём протяжении равномерного движения. Ранее было показано, что продолжительность равномерного движения полярона по цепочке конечна и зависит от множества параметров системы.

В данной работе было рассмотрено влияние характерного размера начального поляронного состояния на продолжительность равномерного движения полярона по цепочке и на характеристики низкоплотных составляющих полярона.

Мы рассмотрели движение полярона в *PolyA/PolyT* цепочке ДНК при фиксированном значении напряжённости постоянного электрического поля и при различных начальных поляронных состояниях. *PolyA/PolyT* цепочке ДНК с зарядом, движущимся по тиминам, соответствуют следующие значения параметров: $\nu_{TT} = \nu = 0.158eV$, $\alpha = 0.13eV/\text{\AA}$, $\gamma = 6 \cdot 10^{-10}g/sec$, $M = 10^{-21}g$, $k = 0.062eV/\text{\AA}^2$ см. [29, 30]. Им соответствуют следующие значения безразмерных параметров: $\varkappa = 4$, $\eta = 2.4$, $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$. На рис. 2 показан переход от равномерного режима движения полярона к колебательному в цепочке с параметрами *PolyA/PolyT* цепочки ДНК.

Для моделирования движения заряда в электрическом поле были использованы также и цепочки с модельными параметрами. В таких

цепочках можно наглядно показать низкоплотные составляющие полярона. В этом случае были выбраны значения безразмерных параметров: $\kappa = 4$, $\eta = 2.4$, а значения частоты колебаний сайтов ω и коэффициента трения ω' при проведении вычислений задавались модельные: $\omega = 1$, $\omega' = 1$. Проведённые вычисления показали, что ширина распределения по сайтам осциллирующей и предшествующей низкоплотных составляющих полярона практически не зависит от начального поляронного состояния и примерно равна максимальной блоховской амплитуде для заданного значения напряжённости электрического поля. Значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к осциллирующей низкоплотной составляющей полярона, заметно увеличиваются с увеличением коэффициента растяжения ξ .

Значения функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, относящиеся к предшествующей низкоплотной составляющей полярона, практически не зависят от значений ξ для большого диапазона значений коэффициента растяжения ξ . И только при очень больших значениях ξ , при которых продолжительность равномерного движения резко сокращается с увеличением ξ , наблюдается явная зависимость всех низкоплотных составляющих полярона от ξ , то есть от начального поляронного состояния. Таким образом, при увеличении характерного размера начального поляронного состояния продолжительность равномерного движения полярона по цепочке сокращается. Сокращение продолжительности равномерного движения полярона происходит постепенно при постепенном увеличении характерного размера начального поляронного состояния. То есть нет никакого критического значения коэффициента растяжения (или сжатия) начального поляронного состояния, при котором резко происходит переход от равномерного к колебательному режиму движения при фиксированном значении напряжённости электрического поля.

Библиографический список

1. Maniadis P., Kalosakas G., Rasmussen K.O., Bishop A.R., ac conductivity in a DNA charge transport model. *Phys. Rev. E*. 2005. V. 72. P. 021912. doi:10.1103/PhysRevE.72.021912
2. Komineas S., Kalosakas G., Bishop A.R. Effects of intrinsic base-pair fluctuations on charge transport in DNA. *Phys. Rev. E*. 2002. V. 65. P. 061905. doi:10.1103/PhysRevE.65.061905
3. Taniguchi M., Kawai T. DNA electronics. *Physica E*. 2006. V. 33. P. 1–12. doi:10.1016/j.physe.2006.01.005
4. Dauxois T., Peyrard M., Bishop A.R. Dynamics and thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation. *Phys. Rev. E*. 1993. V. 47. P. 684. doi:10.1103/PhysRevE.47.684
5. Ojeda J.H., Lima R.P.A., Domínguez-Adame F., Orellana P.A. Trapping and motion of polarons in weakly disordered DNA molecules. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2009. V. 21. P. 285105. doi:10.1088/0953-8984/21/28/285105
6. Peyrard M., Cuesta-Lopez S., James G. Modelling DNA at the mesoscale: a challenge for nonlinear science? *Nonlinearity*. 2008. V. 21. P. 91–100. doi:10.1088/0951-7715/21/6/T02
7. Starikov E.B., Electron–phonon coupling in DNA: a systematic study. *Philosophical Magazine*. 2005. V. 85. P. 3435–3462. doi:10.1080/14786430500157110
8. Korshunova A.N., Lakhno V.D. A new type of localized fast moving electronic excitations in molecular chains. *Physica E*. 2014. V. 60. P. 206–209. doi:10.1016/j.physe.2014.02.025
9. Porath D., Cuniberti G., Di Felice R. Charge transport in DNA-based devices. *Top. Curr. Chem*. 2004. V. 237. P. 183–227. doi:10.1007/b94477
10. Murphy C.J., Arkin M.R., Jenkins Y., Ghatlia N.D., Bossmann S.H., Turro N.J., Barton J.K. Long-range photoinduced electron transfer through a DNA helix. *Science*. 1993. V. 262 (5136). P. 1025–1029. doi:10.1126/science.7802858
11. Feldmann J., Leo K., Shah J., Miller D. A. B., Cunningham J. E., Meier T., von Plessen G., Schulze A., Thomas P. and Schmitt-Rink S. Optical investigation of Bloch oscillations in a semiconductor superlattice. *Phys. Rev. B*. 1992. V. 46. 7252. doi:10.1103/PhysRevB.46.7252

12. Takeya Unuma, Yuto Itagaki and Soichiro Asakura. Room-temperature Bloch oscillations and interminiband Zener tunneling in a GaAs-based narrow-minigap superlattice. *Applied Physics Express*. 2021. V. 14. P. 081003. doi:10.35848/1882-0786/ac114f
13. Meggers E., Michel-Beyerle M.E., Giese B.J. Sequence dependent long range hole transport in DNA. *J. Am. Chem. Soc.* 1998. V. 120. P. 12950–12955. doi.10.1021/ja983092p
14. Fink H.-W., Schönenberger C. Electrical conduction through DNA molecules. *Nature*. 1999. V. 398 (6726). P. 407–410. doi.10.1038/18855
15. Porath D., Bezryadin A., De Vries S., Dekker C. Direct measurement of electrical transport through DNA molecules. *Nature*. 2000. V. 403 (6770). P. 635–638. doi.10.1038/35001029
16. Lewis F.D., Liu X., Liu J., Miller S.E., Hayes R.T., Wasielewski M.R. Direct measurement of hole transport dynamics in DNA. *Nature*. 2000. V. 406. P. 51–53. doi:10.1038/35017524
17. Diaz E., Lima R.P.A., Dominguez-Adame F., Bloch-like oscillations in the Peyrard-Bishop-Holstein model. *Phys. Rev. B*. 2008. V. 78. P. 134303. doi:10.1103/PhysRevB.78.134303
18. Yuan Li, Xiao-jing Liu, Ji-yong Fu, De-sheng Liu, Shi-jie Xie and Liang-mo Mei. Bloch oscillations in a one-dimensional organic lattice *Phys. Rev. B*. 2006. V. 74. P. 184303. doi:10.1103/PhysRevB.74.184303
19. Buarque A. R. C., Lyra M. L. and Dias W. S. Bloch-like superoscillations and unidirectional motion of phase-driven quantum walkers. *Phys. Rev. A*. 2021. V. 103. P. 012222. doi:10.1103/PhysRevA.103.012222
20. Zhongkai Huang, Masayuki Hoshina, Hajime Ishihara, Yang Zhao, Transient Dynamics of Super Bloch Oscillations of a 1D Holstein Polaron under the Influence of an External AC Electric Field. *Annalen der Physik*. 2019. V. 531. P. 1800303. doi:10.1002/andp.201800303
21. Herrero-Gymez C., Diaz E., Dominguez-Adame F. Super Bloch oscillations in the Peyrard–Bishop–Holstein model, *Physics Letters A*. 2012. V. 376. P. 555–558. doi:10.1016/j.physleta.2011.10.053
22. Pereira A.L.S., Lyra M.L., de Moura F.A.B.F., Ranciaro Neto A., Dias W.S. Nonlinear wave-packet dynamics resonantly driven by AC and DC fields. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2018. V. 64. P. 89–97 doi:10.1016/j.cnsns.2018.04.016

23. Holstein T. Studies of polaron motion: Part I. The molecular-crystal model. *Annals of Phys.* 1959. V. 8. P. 325–342. doi:10.1016/0003-4916(59)90002-8
24. Holstein T. Studies of polaron motion: Part II. The "small" polaron. *Annals of Phys.* 1959. V. 8. P. 343–389. doi:/10.1016/0003-4916(59)90003-X
25. Коршунова А.Н., Лахно В.Д. Возникновение внутренней динамики холстейновского полярона в процессе его равномерного движения в полинуклеотидной цепочке в постоянном электрическом поле. *Математическая биология и биоинформатика.* 2022. Т. 17. №2. С. 452–464. doi: 10.17537/2022.17.452
26. Коршунова А.Н., Лахно В.Д. Моделирование стационарных и нестационарных режимов движения заряда в однородной холстейновской цепочке в постоянном электрическом поле. *Журнал технической физики.* 2018. Т. 88. №9. С. 1312–1319. doi:10.21883/JTF.2018.09.46414.14-18
27. Korshunova A.N., Lakhno V.D. Dependence of the nature of the Holstein polaron motion in a polynucleotide chain subjected to a constant electric field on the initial polaron state and the parameters of the chain. *Journal of Physics: Conference Series.* 2022. V. 2155. P. 012031. doi:10.1088/1742-6596/2155/1/012031
28. Lakhno V.D. Soliton-like Solutions and Electron Transfer in DNA. *J. Biol. Phys.* 2000. V. 26. P. 133–147. doi:10.1023/A:1005275211233
29. Lakhno V.D., Fialko N.S. HSSH-model of Hole transfer in DNA. *Eur. Phys. J. B.* 2005. V. 43. 279–281. doi:10.1140/epjb/e2005-00049-y
30. Lakhno V.D., Fialko N.S. Solvation effects on hole mobility in the poly G/Poly C duplex. *Russian Journ. of Phys. Chem.* 2012. V. 86. P. 832–836. doi:10.1134/S0036024412050196
31. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Bloch oscillations of a soliton in a molecular chain. *Euro. Phys. J. B.* 2007. V. 55. P. 85. doi:10.1140/epjb/e2007-00045-3
32. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Electron motion in a Holstein molecular chain in an electric field. *Eur. Phys. J. B.* 2011. V. 79. P. 147–149. doi:10.1140/epjb/e2010-10565-2

Оглавление

1	Введение	3
2	Математическая модель	5
3	Начальные данные	6
4	Движение полярона в цепочке ДНК при различных начальных поляронных состояниях	7
5	Движение полярона в модельной цепочке при различных начальных поляронных состояниях.	10
6	Распределение электронной плотности полярона в полинуклеотидной цепочке при различных начальных поляронных состояниях	16
7	Заключение.	21
	Библиографический список	23