

УДК: 519.6, 51-7

## Особенности движения полярона в молекулярных полинуклеотидных цепочках конечной длины

©2016 Коршунова А.Н.<sup>1</sup>, Лахно В.Д.<sup>2</sup>

*Институт математических проблем биологии РАН, Пущино,  
Московская область, Россия*

**Аннотация.** На основе модели Пейрарда-Бишопа-Холстейна проведены численные эксперименты, демонстрирующие возможность переноса заряда поляронами в однородной конечной незамкнутой G/C цепочке ДНК при отсутствии электрического поля и дополнительных возбуждений в цепочке. Показано, что полярон, помещённый в начальный момент времени не в центр цепочки, приобретает способность двигаться. Показано также, что скорость движения полярона по цепочке зависит от его начальной формы.

**Ключевые слова:** ДНК, нанобиоэлектроника, полярон, модель Пейрарда-Бишопа-Холстейна, подвижность.

### ВВЕДЕНИЕ

В связи с открытием проводящих свойств ДНК [1, 2], особую важность приобрело моделирование переноса заряда в полинуклеотидных цепочках. Наиболее перспективным в настоящее время считается создание нанопроводов на основе однородных синтетических нуклеотидных последовательностей — олигонуклеотидов или полинуклеотидов. Основным носителем тока в таких последовательностях является полярон [3, 4, 5]. Изучению динамики поляронных состояний в молекулярных цепочках посвящено большое число работ, которые включают в себя исследование динамики в постоянном и переменном электрических полях, при импульсном силовом воздействии, при воздействии температурных флуктуаций и т. д. [6, 7, 8, 9, 10].

При получении конкретных результатов моделирования, как правило, не обсуждаются возникающие вычислительные проблемы. Даже простейший вопрос о том, в равновесном или неравновесном состоянии находится исходное поляронное состояние не имеет ясного ответа. Восполнить этот пробел призвана настоящая работа. В данной работе мы покажем, что от ответа на этот вопрос кардинальным образом зависит последующая динамика полярона.

### МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Динамика квантовой частицы в классической цепочке описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений, которая в безразмерных переменных имеет вид [7]:

$$\dot{c}_n = i\tau_e(c_{n-1} + c_{n+1}) - i\chi_{el}q_n c_n \quad (1)$$

$$\ddot{q} + \Gamma\dot{q} = e^{-q_n}(e^{-q_n} - 1) + \omega_{bond}^2(q_{n-1} - 2q_n + q_{n+1}) - \chi_h|c_n|^2, \quad (2)$$

<sup>1</sup>alya@impb.psn.ru

<sup>2</sup>lak@impb.psn.ru

где  $c_n$  – амплитуды вероятности локализации заряда на  $n$ -ом сайте,  $\sum_n |c_n|^2 = 1$ ,  $\tau_e$  – отношение характерных времён эволюции волновой функции электрона и динамики возмущений в решётке,  $\chi_{el}$  и  $\chi_h$  – безразмерные параметры связи электрона и решётки,  $q_n$  – нормированное смещение,  $\omega_{bond}$  – нормированная частота колебаний сайтов в решётке. В классические уравнения движения (2) введена диссипация, определяемая коэффициентом трения  $\Gamma$ .  $\omega_M$  – частота линейных колебаний в изолированном сайте,  $\tilde{t} = \omega_M t$  – безразмерное время.

(1) – дискретные уравнения Шрёдингера для электрона,

(2) – уравнения движения нуклеотидных пар.

Система нелинейных дифференциальных уравнений (1), (2) решается методами (а) – типа Рунге-Кутты четвертого порядка и (б) – явного четырёхшагового метода Адамса-Бэшофота на этапе предсказания и расчётом поправки трехшаговым методом Адамса-Мултона. Расчёты выполнялись с использованием вычислительных средств кластеров ИМПБ РАН и МСЦ РАН.

Цепочка рассматривается однородная, незамкнутая, то есть цепочка имеет два конца, это существенно для исследования движения поляронных состояний в цепочке в отсутствие электрического поля. В однородной замкнутой цепочке полярон (и растянутый в том числе) может находиться в любом месте цепочки и его реакция на это положение будет одинакова. Если сравнивать замкнутую и незамкнутую цепочки, то полярон в замкнутой цепочке всегда ведёт себя подобно полярону в центре незамкнутой цепочки.

### РАЗМЕР ПОЛЯРОНА ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЙ КОНСТАНТЫ СВЯЗИ. ПОЛЯРОН УСТОЯВШИЙСЯ И НЕУСТОЯВШИЙСЯ - ОПРЕДЕЛЕНИЕ И РАЗЛИЧИЯ

Численные значения параметров, используемые в моделировании, выбраны в соответствии с параметрами модели Пейрарда-Бишопа-Холстейна (ПБХ) в работе [7]. Полинуклеотидной цепочке *polyG/polyC* соответствуют следующие значения параметров:  $\tau_e = 18$ ,  $\chi_{el} = 8.5$ ,  $\chi_h = 0.5$ ,  $\omega_{bond} = 0.2$ ,  $\Gamma = 0.084$ . При таких параметрах цепочки в ПБХ модели полярон располагается на достаточно большом количестве сайтов:  $\lim_{\tilde{t} \rightarrow \infty} d(\tilde{t}) \approx 52$ , см. рис. 1 для  $\chi_{el} = 8.5$ ,  $d(\tilde{t})$  – характерный размер полярона:

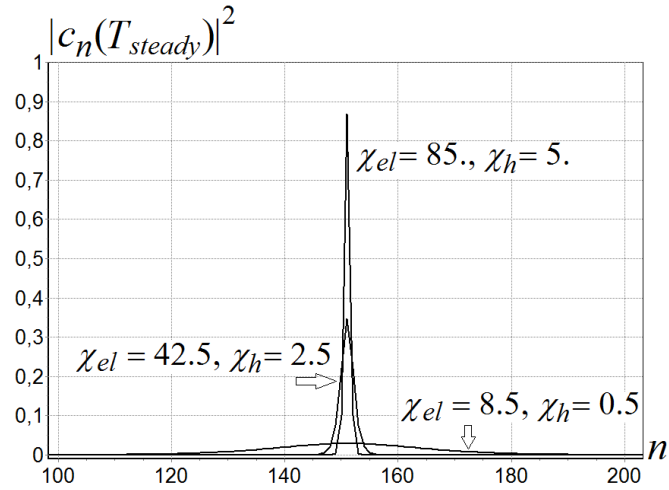
$$d(\tilde{t}) = \sum |c_n(\tilde{t})|^2 / \sum |c_n(\tilde{t})|^4 = 1 / \sum |c_n(\tilde{t})|^4. \quad (3)$$

На рисунке 1 приведены также распределения электронной вероятности для  $\chi_{el} = 42.5$  и для  $\chi_{el} = 85$ . Соответствующий характерный размер  $d(\infty)$  вида (3) для  $\chi_{el} = 42.5$  равен  $d(\infty) \approx 4.0$ , для  $\chi_{el} = 85$ . –  $d(\infty) \approx 1.3$  (полярон малого радиуса).

Для моделирования поведения полярона в конечной цепочке можно поместить в цепочку полярон, соответствующий стационарному решению континуальных уравнений (1), (2) для случая бесконечной цепочки. Центр этого полярона помещается на сайт цепочки с номером  $n_0$ . Таким образом, начальные значения выбираются в виде обратного гиперболического косинуса:

$$|c_n(0)| = \frac{\sqrt{2}}{4} \sqrt{\frac{\chi_{el} \cdot \chi_h}{\tau_e}} \operatorname{ch}^{-1} \left( \frac{(\chi_{el} \cdot \chi_h)(n - n_0)}{4\tau_e} \right), \quad q_n(0) = |c_n(0)|^2 \cdot \chi_h, \quad \dot{q}_n(0) = 0. \quad (4)$$

Но такой полярон не является "устоявшимся" или неподвижным в цепочке. Устоявшийся полярон можно получить если поместить в центр цепочки полярон вида (4), и он со временем преобразуется в устоявшийся, неподвижный. Устоявшийся полярон можно так же получить достаточно быстро из начального равномерного



**Рис. 1.** Графики функции  $|c_n|^2$  устоявшиеся в центре цепочки длиной  $N = 301$  сайт для различных значений параметров  $\chi_{el}$  и  $\chi_h$ .

распределения  $|c_n(0)| = 1/\sqrt{N}$ , при небольшой длине цепочки, когда в цепочке помещается только один полярон [13] (для выбранных значений параметров цепочки). Ускоряет образование устоявшегося полярона выбор большого значения коэффициента трения, в данной работе для этой цели брали  $\Gamma = 1$ .

Для поляронов очень большого радиуса (например  $d(\infty) \approx 52$ ), полярон вида (4) очень близок к устоявшемуся, но от более узких поляронов (например  $d(\infty) \approx 4$ ) отличается значительно. Заметим, что полярон радиуса  $d(\infty) \approx 4$  тоже является поляроном большого радиуса, поляроном малого радиуса считается полярон с радиусом (или характерным размером) близким к единице.

Хотя полярон, соответствующий стационарному решению уравнений (1), (2) в континуальном пределе, не является устоявшимся, а только лишь хорошим к нему приближением, мы будем в дальнейшем использовать его модификацию для начальных значений функций  $|c_n(0)|$  и  $q_n(0)$ :

$$|c_n(0)| = \frac{\sqrt{2}}{4} \sqrt{\frac{\chi_{el} \cdot \chi_h}{\tau_e \xi}} \operatorname{ch}^{-1} \left( \frac{(\chi_{el} \cdot \chi_h)(n - n_0)}{4\tau_e \xi} \right), \quad q_n(0) = |c_n(0)|^2 \cdot \chi_h / \xi, \quad (5)$$

где  $\xi$  — коэффициент растяжения, с помощью которого мы можем взять начальный полярон уже или шире устоявшегося, а так же, для любых параметров цепочки, подобрать начальный полярон вида (5) максимально близким к устоявшемуся. Таким образом, выражение вида (5), при правильно подобранном значении  $\xi$ , можно считать приближённым стационарным решением уравнений (1), (2).

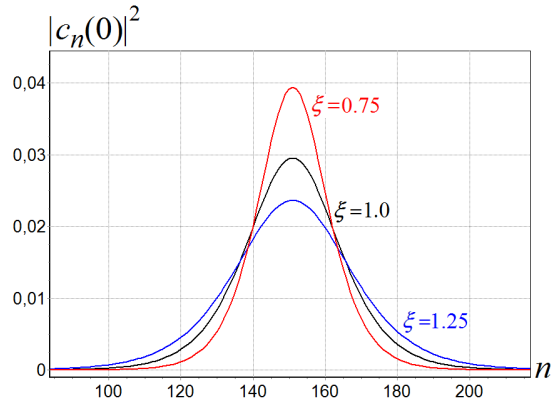
Определим, какой полярон мы будем считать устоявшимся, введём критерий неподвижности полярона. Понятно, что полярон неподвижен, если  $\sum_n \dot{q}_n^2(\tilde{t}) = 0$ . Будем считать, что полярон является устоявшимся, если  $\sum_n \dot{q}_n^2(\tilde{t}) < \varepsilon$  для любого  $\tilde{t} > T_{steady}$ ,  $\varepsilon$  — величина близкая к нулю,  $T_{steady}$  — время установления полярона.

## ДВИЖЕНИЕ ПОЛЯРОНА В ЦЕПОЧКЕ ВСЛЕДСТВИЕ АСИММЕТРИЧНОСТИ ЕГО ПОЛОЖЕНИЯ В ЦЕПОЧКЕ

### 1. Движение широкого полярона с характерным размером $d(\infty) \approx 52$ .

Рассмотрим поведение полярона очень большого радиуса в зависимости от начального расположения полярона в конечной незамкнутой цепочке. Возьмём цепочку

с безразмерными параметрами связи электрона и решётки  $\chi_{el} = 8.5$  и  $\chi_h = 0.5$ . Устоявшийся полярон в такой цепочке очень близок к функции вида (5) для  $\xi = 1.0$  (см. рис. 2). Континуальное приближение (5) при таких параметрах цепочки выполняется очень хорошо. Полярон, помещённый в центр цепочки, не сдвигается из этого положения.



**Рис. 2.** Графики функции  $|c_n(0)|^2$  вида (5) для полярона, расположенного в центре цепочки длиной  $N = 301$  сайт для различных значений параметра  $\xi$  при  $\chi_{el} = 8.5$  и  $\chi_h = 0.5$ . График функции для  $\xi = 1.0$  практически совпадает с графиком устоявшегося полярона.

Рассмотрим поведение в цепочке широкого полярона, начальное положение которого не совпадает с центром цепочки. Сначала возьмём цепочку с небольшим значением коэффициента трения  $\Gamma = 0.001$ . Поместим в цепочку численно полученный устоявшийся полярон для которого  $\sum_n \dot{q}_n^2(\tilde{t}) < 1 \cdot 10^{-9}$ . Сравним его поведение с поведением начального полярона вида (5) для  $\xi = 1$ . На рисунке 3 представлены графики функции  $X(\tilde{t})$ , описывающей поведение центра масс частицы:

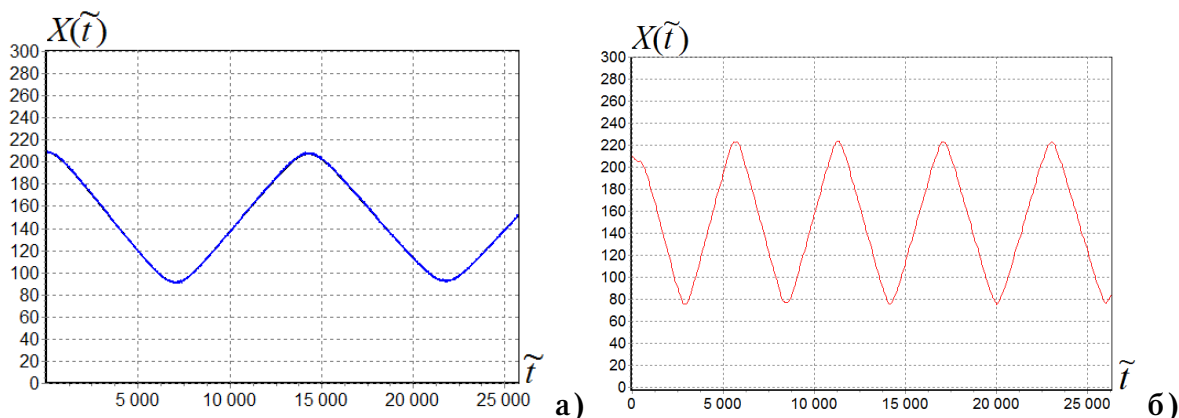
$$X(\tilde{t}) = \sum_n |c_n(\tilde{t})|^2 n. \quad (6)$$

На рисунке 3,а в качестве начального полярона взят устоявшийся полярон, на рисунке 3,б в качестве начального полярона взят полярон вида (5) для  $\xi = 1.0$ . Напомним, что устоявшийся полярон в такой цепочке настолько близок к функции вида (5) для  $\xi = 1.0$ , что в масштабе графиков на рисунке 2 графики этих функций просто полностью совпадают. Длина цепочки составляет 301 сайт, центр начального полярона находился на сайте с номером  $n_0 = 210$  в обоих случаях.

Напомним, что характерный размер полярона для выбранных параметров цепочки около 52 сайтов. Центр начального полярона отстоит от края цепочки на 90 сайтов, то есть форма полярона сохраняется достаточно хорошо, значения его функций вероятностей и смещений около ближайшего конца цепочки очень малы. Но, тем не менее, в обоих случаях, и устоявшийся и неустоявшийся поляроны движутся. На рисунке 3 хорошо видно, что поляроны движутся с разной скоростью и с разными амплитудами по сайтам цепочки. В силу наличия диссипации центр тяжести полярона испытывает затухающие осцилляции вокруг центра цепочки.

Почему несимметрично расположенный в цепочке полярон движется?

Если полярон вида (5) поместить в центр цепочки, то очень маленькие значения его функций вероятностей и смещений на "хвостах" вне центральной части отражаются от концов цепочки симметрично, и такой полярон не сдвигается. Со временем начальный полярон переходит в устоявшийся, значения его функций на концах становятся ещё меньше,  $\sum_n \dot{q}_n^2(\tilde{t}) \rightarrow 0$ . Для маленького значения коэффициента трения  $\Gamma = 0.001$



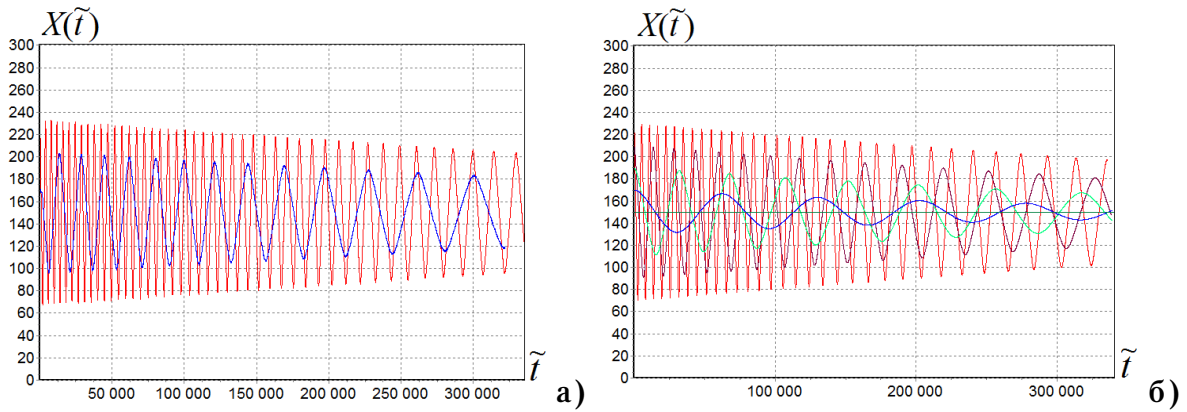
**Рис. 3.** Графики функции  $X(\tilde{t})$  вида (6), а) - начальный полярон устоявшийся, б) - начальный полярон вида (5) для  $\xi = 1.0$ . Длина цепочки  $N = 301$  сайт, коэффициент трения  $\Gamma = 0.001$ ,  $n_0 = 210$ .

процесс перехода полярона в устоявшийся особенно долгий, поэтому значения функций полярона на "хвостах" сохраняются достаточно большое время.

Если начальный полярон находится не в центре цепочки, то значения его функций вероятностей и смещений у концов цепочки, хотя и близкие к нулю, но различные. Кроме того, отразившиеся от концов цепочки малозначимые "хвосты полярона", приходят к центру полярона с различными значениями. И даже для начального полярона с  $\sum_n \dot{q}_n^2(\tilde{t}) < 1 \cdot 10^{-9}$  образовавшегося малозначимого несимметричного возбуждения в цепочке (с  $\Gamma = 0.001$ ) достаточно, чтобы сдвинуть полярон (см. рис. 3,а). Заметим, что даже если  $\sum_n \dot{q}_n^2(\tilde{t}) \approx 0$ , но полярон находится не в центре цепочки, то значения его функций вероятностей и смещений, хотя и очень маленькие, но у концов цепочки различные, что уже обеспечит несимметричное возбуждение с маленькими значениями функций вероятностей и смещений в цепочке, которое, при очень малом трении в цепочке, может сдвинуть полярон. Чем больше длина цепочки и чем дальше от концов находится несимметрично расположенный полярон (даже и не вполне устоявшийся), тем меньше значения смещений сайтов и  $|c_n(\tilde{t})|^2$  полярона у концов цепочки и тем больше время за которое отражения функций  $q_n(\tilde{t})$  и  $|c_n(\tilde{t})|$  от концов цепочки (затухающие при наличии трения) придут к центру полярона. А следовательно, начальный полярон успеет приблизиться к устоявшемуся, и очень маленькое несимметричное возбуждение в цепочке такой полярон сдвинуть не сможет. Очевидно, что наименьшей подвижностью обладает устоявшийся полярон. Условия, при которых устоявшийся и находящийся не в центре цепочки полярон сдвинется из своего положения, зависят от многих параметров: от размера полярона, от трения, от положения полярона в цепочке, от длины цепочки, иначе говоря, практически от всех параметров цепочки.

Нас интересует, конечно, не только сама возможность сдвинуть полярон из начального положения, но, в первую очередь, как заставить полярон двигаться в цепочке без поля быстро и далеко.

На рисунке 4 представлены примеры движения поляронов из начального поляронного состояния вида (5) для  $\xi = 0.75$  и  $\xi = 1.0$  (см. рис. 2) в цепочке длиной 301 сайт из различных начальных положений. Полярон вида (5) для  $\xi = 0.75$  уже и выше устоявшегося полярона. Из этих примеров следует, что, чем ближе находится центр начального полярона к краю цепочки, тем больше скорость его движения для обоих выбранных значений параметра  $\xi$  (заметим, что это верно в показанном случае). Поскольку в цепочке есть небольшое трение  $\Gamma = 0.001$ , скорость и амплитуда



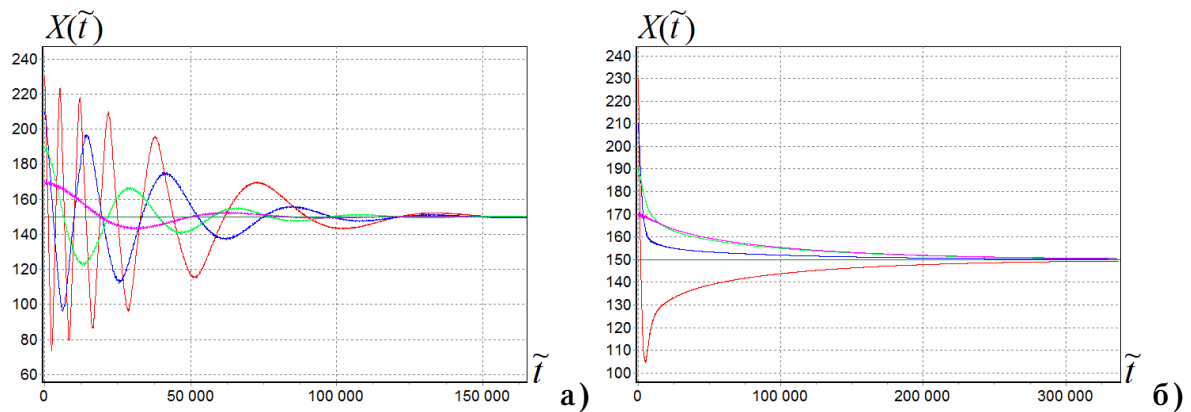
**Рис. 4.** Графики функции  $X(\tilde{t})$  вида (6) для различных значений параметра  $\xi$ , а) -  $\xi = 0.75$ ,  $n_0 = 230$  и  $n_0 = 170$ , б) -  $\xi = 1.0$ ,  $n_0 = 230, 210, 190, 170, 150$ . Длина цепочки  $N = 301$  сайт, коэффициент трения  $\Gamma = 0.001$ . Сайты в цепочке считаются от 0 до 300 ( $N = 301$  сайт), центр цепочки - сайт с номером 150.

движения полярона со временем затухают. Если начальные поляроны расположить на обеих половинах цепочки симметрично относительно центра, то они будут двигаться навстречу друг другу (графики не представлены). То есть, для цепочки длиной 301 сайт и полярона с характерным размером 52 сайта (для устоявшегося в цепочке) полярон движется в сторону от ближайшего края цепочки. Ниже мы покажем, что это не всегда так (см. рис. 6).

На рисунке 4,а ( $\xi = 0.75$ ) показаны графики функции  $X(\tilde{t})$  для начальных поляронов с центрами на сайтах  $n_0 = 230$  (красный) и  $n_0 = 170$  (синий). На рисунке 4,б ( $\xi = 1.0$ ) тоже есть графики для таких же начальных положений, красный и синий соответственно. Сравнивая эти графики можно сделать следующие выводы. Скорость движения полярона будет больше, если взять начальный полярон немного отличающимся от устоявшегося, в данном примере – выше и уже (см. рис. 2). Затухают колебательные движения полярона в цепочке медленнее, если начальный полярон уже устоявшегося. Заметим, что более узкий начальный полярон (по сравнению с устоявшимся), можно расположить ближе к краю цепочки без ощутимого искажения его формы, что даст возможность придать ему большую скорость. Нельзя сильно вытягивать в высоту или растягивать в ширину начальный полярон в цепочке, так как при увеличении искажения движение полярона становится негладким, при большем увеличении искажения полярон разваливается.

Вообще говоря, возникает вопрос о корректности рассмотрения поляронов как локализованных объектов в коротких цепочках, когда значения их функций вероятностей и смещений сайтов у краёв цепочки достаточно велики и их отражения могут сдвинуть полярон в случае его несимметричного положения. Использование замкнутой цепочки никоим образом не избавляет от этого вопроса, поскольку значения  $|c_n|^2$  и  $q_n$  полярона в точке, отстоящей на половину длины замкнутой цепочки, можно считать значениями на концах полярона. И чем короче замкнутая цепочка, тем сильнее образующееся поляронное состояние в короткой замкнутой цепочке будет отличаться от полярона в бесконечной цепочке, скорее всего такое состояние уже нельзя считать поляроном. Некоторым "оправданием" использования в вычислениях недостаточно длинных незамкнутых цепочек и более узких (по сравнению с устоявшимся) поляронных состояний вблизи края цепочки может служить следующий пример. Возьмём цепочку длиной несколько тысяч сайтов с поляроном в центре и приложим к цепочке небольшое



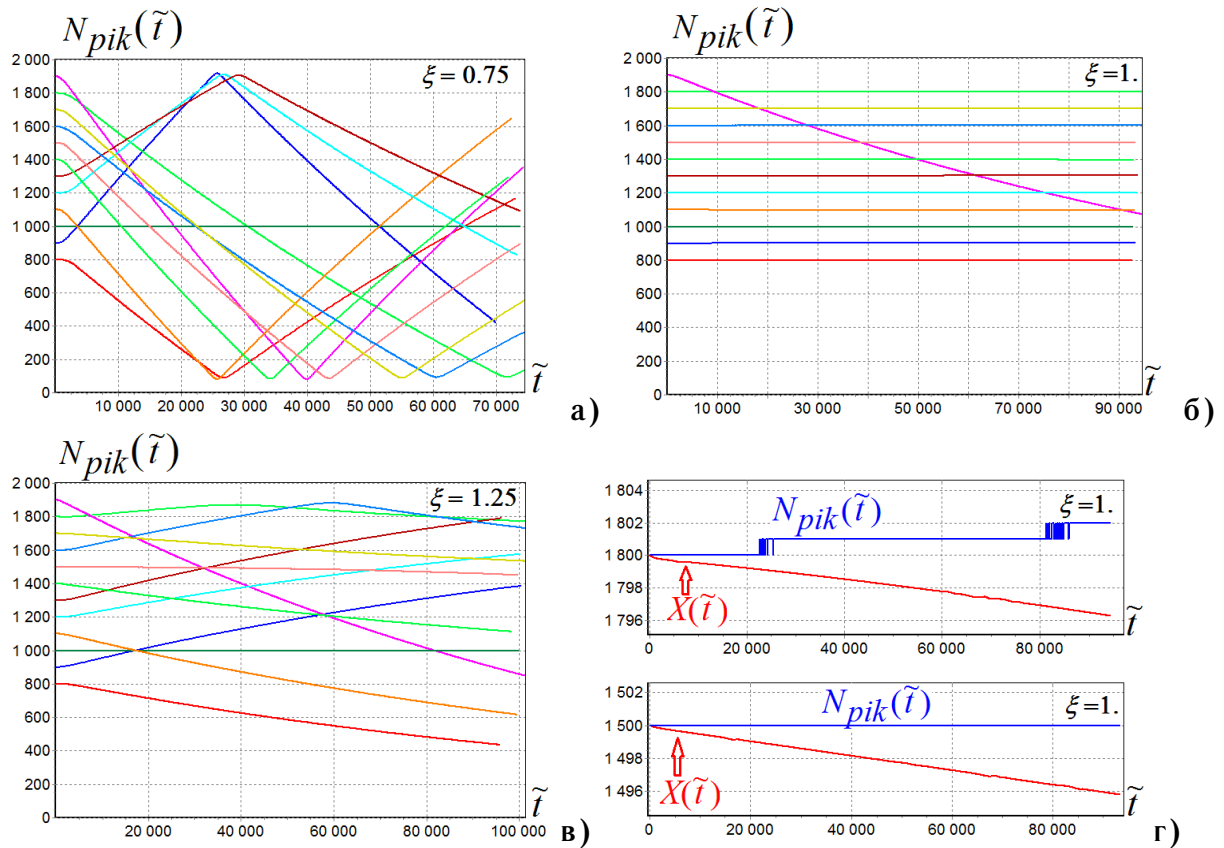


**Рис. 5.** Графики функции  $X(\tilde{t})$  вида (6) для  $\xi = 0.75$  при различных значениях коэффициента трения  $\Gamma$  а) -  $\Gamma = 0.01$ , б) -  $\Gamma = 0.084$ . Длина цепочки  $N = 301$  сайт. Центры начальных поляронов находятся на сайтах с номерами  $n_0 = 230, 210, 190, 170, 150$  на графиках а) и б).

постоянное электрическое поле, чтобы полярон двигался с небольшой постоянной скоростью, сохраняя свою форму. В момент, когда полярон достигнет края цепочки и будет становиться более узким и высоким от взаимодействия с краем цепочки, отключим поле. После этого полярон, отразившись от края цепочки, будет двигаться по цепочке. В этом случае начальным поляронным состоянием был "прижатый" к краю цепочки полярон в момент отключения поля. То есть, использование полярона более узкого, чем устоявшийся полярон (или функции вида (5) уже устоявшегося полярона) у края цепочки в качестве начального полярона для запуска движения полярона в цепочке при отсутствии электрического поля вполне оправдано.

В отличие от устоявшегося, более узкий полярон можно расположить ближе к краю цепочки без искажения его формы, а главное - сохранив нормировку:  $\sum_n |c_n|^2 = 1$ . Такие действия имеют смысл и значение для изучения возможности переноса заряда в цепочке (при отсутствии электрического поля) с помощью внесения в цепочку различных возмущений, например, бризеров, баблов, когда край цепочки искусственно создаётся [7]. При наличии полярона в цепочке, можно сформировать в цепочке смещение сайтов или бризер как угодно близко к полюрону. В таком случае, правильно подобранное смещение сайтов в цепочке может быть использовано как край цепочки, и тогда важно понимание взаимодействия полярона с концом цепочки.

Выбор длины цепочки, которую можно считать допустимой, чтобы представление о поляроне как о локализованном объекте "работало", зависит от параметров цепочки. Если размер устоявшегося полярона в цепочке 52 сайта, то длину цепочки нужно брать значительно больше, чем в случае цепочки с размером устоявшегося полярона в 4 сайта. Кроме того большое значение имеет величина коэффициента трения  $\Gamma$ . На рисунке 5 показаны графики функции  $X(\tilde{t})$  для различных значений коэффициента трения  $\Gamma$ , на рисунке 5,а -  $\Gamma = 0.01$ , на рисунке 5,б -  $\Gamma = 0.084$ . В качестве начального полярона на рисунках 5,а и 5,б взята функция вида (5) при  $\xi = 0.75$ , это поляронное состояние более узкое, чем устоявшийся полярон. Центры начальных поляронов находятся на одинаковых сайтах на рис. 5,а и на рис. 5,б. На рисунке 4,а показаны графики функции  $X(\tilde{t})$  для  $\Gamma = 0.001$  при  $\xi = 0.75$ . Сравнивая эти три графика (рис. 5,а и 5,б и рис. 4,а), легко заметить, как сильно зависит движение полярона от значения коэффициента трения  $\Gamma$ . На рисунках 5,а и 5,б и на рисунке 4,б показаны графики функции  $X(\tilde{t})$  для начальных поляронов в центре цепочки,  $n_0 = 150$ , как и положено, они не смещаются из



**Рис. 6.** Графики положения пика полярона для различных значений параметра  $\xi$ : а) —  $\xi = 0.75$ , б),г) —  $\xi = 1.0$ , в) —  $\xi = 1.25$ . Длина цепочки  $N = 2001$  сайт, коэффициент трения  $\Gamma = 0.001$ . Центры начальных поляронов находятся на сайтах с номерами  $n_0 = 800, 900, 1000, 1100, 1200, 1300, 1400, 1500, 1600, 1700, 1800, 1900$  на графиках а), б), в) и на сайтах с номерами  $n_0 = 1500, 1800$  на графиках г).

центра.

Цепочку длиной  $N = 301$  сайт можно считать очень короткой для случая цепочки с устоявшимся поляроном с характерным размером 52 сайта. Рассмотрим, как будет двигаться такой полярон в цепочке 2001 сайт. Введём функцию  $N_{pik}(\tilde{t})$ , показывающую положение пика полярона, или номер сайта, на котором находится максимум функции  $|c_n(\tilde{t})|^2$ . На рисунке 6 представлены графики положения пика полярона  $N_{pik}(\tilde{t})$  для трёх различных типов начального поляронного состояния вида (5). На рисунке 6,а  $\xi = 0.75$ , то есть начальное поляронное состояние уже и выше устоявшегося полярона. На рисунках 6,б и 6,г —  $\xi = 1.0$ , то есть начальное поляронное состояние близко к устоявшемуся. На рисунке 6,в  $\xi = 1.25$  - начальный полярон шире устоявшегося полярона.

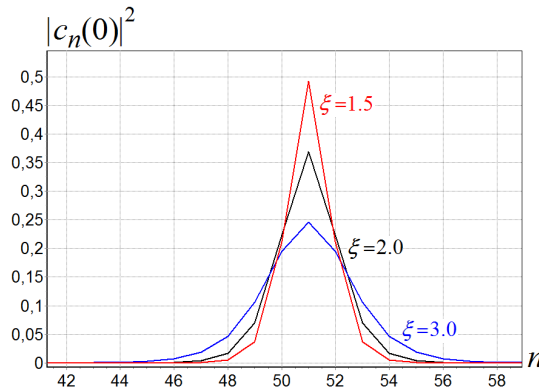
В данном примере выбраны не графики функции  $X(\tilde{t})$ , а графики, показывающие положение пика полярона, или номер сайта, на котором находится максимум функции  $|c_n(\tilde{t})|^2$ . Графики этих функций близки для цепочки длиной  $N = 301$  сайт, и немного отличаются для более длинной цепочки. Особенно это заметно для графиков на рисунке 6,б, где многие графики  $N_{pik}(\tilde{t})$  показывают, что пик полярона почти неподвижен. А графики функции  $X(\tilde{t})$ , описывающие средневзвешенное положение, показывают небольшое смещение относительно пика полярона (рис. 6,г), поскольку цепочка длинная и поляроны находятся не в центре. Центр цепочки находится на сайте с номером  $n_0 = 1000$ , и если начальный полярон находится в центре цепочки, то он неподвижен



и графики функций  $X(\tilde{t})$  и  $N_{\text{pik}}(\tilde{t})$  практически совпадают. На двух графиках рисунка 6,г представлены два примера сравнения функции  $X(\tilde{t})$  и функции, показывающей положение пика полярона —  $N_{\text{pik}}(\tilde{t})$ . В обоих случаях центры начальных поляронов находятся не в центре цепочки. Графики функций  $X(\tilde{t})$  на рисунке 6,г показывают смещение полярона в сторону более удалённого конца цепочки, так как с этой стороны от центра полярона суммируется большее количество значений функции  $|c_n(\tilde{t})|^2$ , хотя и очень малых. При этом пик полярона в одном случае неподвижен, хотя и находится не в центре цепочки (нижний график рисунка 6,г), а в другом случае (верхний график) пик полярона смещается с сторону более близкого конца цепочки на два сайта за очень большое время, а график функции  $X(\tilde{t})$  указывает на смещение центра тяжести полярона в противоположную сторону. Так как в данном случае нас интересует движение именно центральной части полярона ("макро части" полярона) то, в данном случае, более правильным является рассмотрение положения пика полярона.

Из графиков, представленных на рисунке 6, следует, что наименьшей подвижностью обладает полярон, стартовавший из более близкого к устоявшемуся поляронного состояния. Поляроны, стартовавшие из более узкого, по сравнению с устоявшимся, поляронного состояния ( $\xi = 0.75$ ) движутся быстрее, чем поляроны стартовавшие из растянутого, более широкого, поляронного состояния ( $\xi = 1.25$ ). Из рисунка 6,б следует, что движется только полярон, стартовавший с более близкого к краю положения, остальные поляроны практически неподвижны. На рисунках 6,а и 6,в хорошо видно, что поляроны не всегда движутся в сторону от ближайшего конца цепочки. В целом скорость полярона не зависит пропорционально расстоянию до ближайшего конца цепочки, как в случае более короткой цепочки длиной 301 сайт. Для всех показанных примеров скорость движения поляронов убывает (коэффициент трения  $\Gamma = 0.001$ ) и графики функций  $X'(\tilde{t})$  представляют собой убывающие функции (рисунки не представлены).

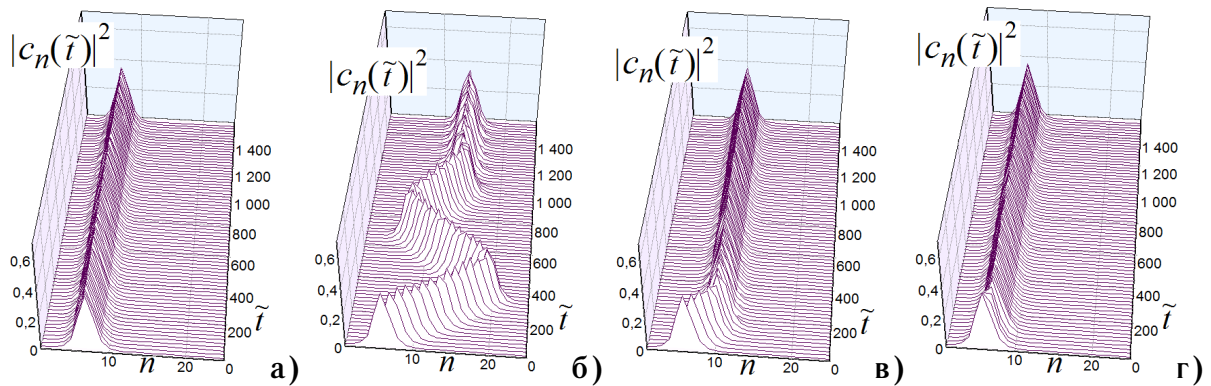
## 2. Движение полярона с характерным размером $d(\infty) \approx 4.0$



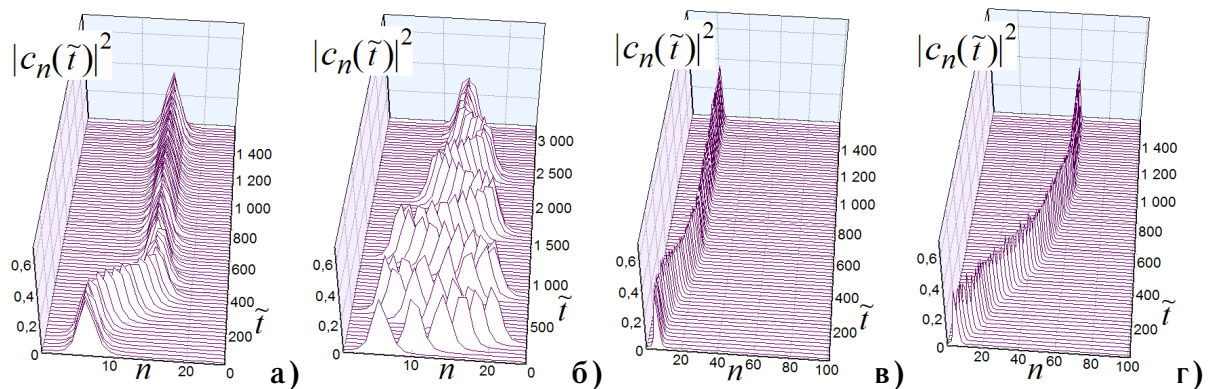
**Рис. 7.** Графики функции  $|c_n(0)|^2$  вида (5) в центре цепочки длиной  $N = 101$  сайт для различных значений параметра  $\xi$  при  $\chi_{el} = 42.5$  и  $\chi_h = 2.5$ . График функции для  $\xi = 2.0$  практически совпадает с графиком устоявшегося полярона.

Выше мы рассмотрели поведение полярона очень большого радиуса ( $\approx 52$  сайта для устоявшегося полярона) в короткой цепочке длиной 301 сайт и в длинной цепочке — 2001 сайт. Напомним, что континуальное приближение (5) для такого полярона выполнялось хорошо, и устоявшийся полярон в такой цепочке очень близок к функции вида (5) для  $\xi = 1.0$  (см. рис. 2).

Рассмотрим теперь поведение полярона в цепочке с безразмерными параметрами связи электрона и решётки  $\chi_{el} = 42.5$  и  $\chi_h = 2.5$ . Континуальное приближение (4) при таких параметрах цепочки выполняется только приблизительно, устоявшийся полярон в этом случае близок к функции вида (5) для  $\xi = 2.0$  (см. рис. 7). Устоявшийся полярон в такой цепочке, так же как и рассмотренный выше, не является поляроном малого радиуса, имеет характерный размер  $d(\infty) \approx 4.0$ .



**Рис. 8.** Графики функции  $|c_n(\tilde{t})|^2$ . В качестве начального полярона взят численно полученный устоявшийся полярон. Длина цепочки  $N = 25$  сайтов. Сайты считаются от 0 до 24. На рисунках а) и б) коэффициент трения  $\Gamma = 0.001$ , на рисунке в)  $\Gamma = 0.01$ , на рисунке г)  $\Gamma = 0.084$ . Центр начального полярона на рисунке а) находится на сайте с номером  $n_0 = 6$ , центры начальных поляронов на рисунках б), в) и г) находятся на сайтах с номером  $n_0 = 5$ .



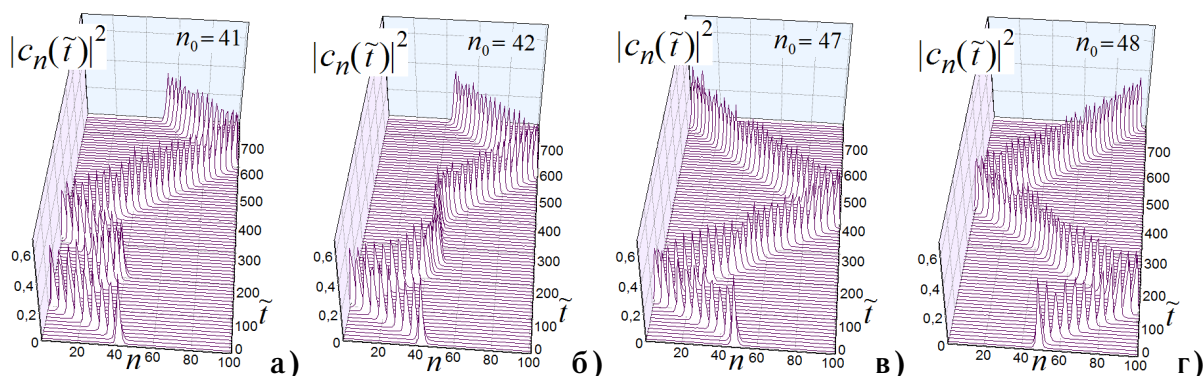
**Рис. 9.** Графики функции  $|c_n(\tilde{t})|^2$ . В качестве начального полярона взята функция вида (5) при  $\xi = 2.0$ . Длина цепочки  $N = 25$  сайтов на рисунках а) и б),  $N = 101$  сайт на рисунках в) и г). Сайты считаются от 0. Коэффициент трения  $\Gamma = 0.001$  для всех графиков. Центры начальных поляронов на рисунках а) и в) находятся на сайте с номером  $n_0 = 6$ , центры начальных поляронов на рисунках б) и г) находятся на сайтах с номером  $n_0 = 5$ .

Если для полярона большого радиуса (52 сайта) короткую цепочку мы брали длиной 301 сайт, то для полярона радиуса 4 сайта пропорциональной короткой цепочкой будет цепочка длиной 25 сайтов. На рисунке 8 представлены графики функции  $|c_n(\tilde{t})|^2$ : во всех четырёх случаях, начальным поляроном является численно полученный устоявшийся полярон для которого  $\sum_n \dot{q}_n^2(\tilde{t}) < 1 \cdot 10^{-7}$ . Только на рисунке 8,а центр начального полярона находится на сайте с номером  $n_0 = 6$ , его форма сохраняется хорошо, значение функции  $|c_n(0)|^2$  на ближайшей границе цепочки достаточно близко к нулю.

Мы видим, что такой полярон не сдвигается с места, несмотря на маленькое трение  $\Gamma = 0.001$ . Для больших значений коэффициента трения или для более отстоящих от конца цепочки начальных поляронов движения полярона в цепочке не наблюдается. На рисунках 8,б–г центр начального полярона находится ближе к концу цепочки – на сайте с номером  $n_0 = 5$ . Форма начального полярона в этом случае в масштабе целого полярона тоже не нарушается, нормировка  $\sum_n |c_n|^2 = 1$  сохраняется достаточно хорошо, но этого смещения оказывается достаточно, чтобы начальный устоявшийся полярон начал двигаться. На рисунках 8,б–г представлены графики функции  $|c_n(\tilde{t})|^2$  для различных значений коэффициента трения: б)  $\Gamma = 0.001$ , в)  $\Gamma = 0.01$ , г)  $\Gamma = 0.084$ . На представленных графиках хорошо видно, что с увеличением трения в цепочке движение полярона ослабевает, и в случае цепочки с трением  $\Gamma = 0.084$  начальный устоявшийся полярон сдвигается всего на один сайт.

Для всех графиков, представленных на рисунке 9, в качестве начального полярона взята функция близкая к устоявшемуся полюрону, а именно – функция вида (5) при  $\xi = 2.0$ . Коэффициент трения для всех графиков один и тот же:  $\Gamma = 0.001$ . Если начальный устоявшийся полярон с центром на сайте с номером  $n_0 = 6$  не сдвигался (см. рис. 8,а), то полярон вида (5) при  $\xi = 2.0$ , немного постояв на месте, сдвигается на девять сайтов (см. рис. 9,а). Как и устоявшийся полярон (см. рис. 8,а и 8,б), так и начальный полярон вида (5) при  $\xi = 2.0$ , придвинутый ближе к концу цепочки –  $n_0 = 5$ , более подвижен (см. рис. 9,а и 9,б). Заметим, что шкала по  $\tilde{t}$  на рисунке 9,б, в два раза больше, чем на других графиках, показанных на этом рисунке.

На рисунках 9,в и 9,г показано движение полярона из начальной функции вида (5) при  $\xi = 2.0$  в цепочке длиной  $N = 101$  сайт. Хорошо видно, что полярон движется быстрее и на большее расстояние, если находится ближе к концу цепочки. Если начальный полярон вида (5) при  $\xi = 2.0$  находится на сайте с номером  $n_0 = 7$  или больше, то он из начального положения не сдвигается даже при таком маленьком трении  $\Gamma = 0.001$  (так же как и устоявшийся начальный полярон).



**Рис. 10.** Графики функции  $|c_n(\tilde{t})|^2$ . В качестве начального полярона взята функция вида (5) при  $\xi = 1.5$ . Длина цепочки  $N = 101$  сайт на всех рисунках. Сайты считаются от 0. Коэффициент трения  $\Gamma = 0.001$  для всех графиков. Центр начального полярона на рисунке а) находится на сайте с номером  $n_0 = 41$ , на рисунке б) – на сайте с номером  $n_0 = 42$ , на рисунке в) – на сайте с номером  $n_0 = 47$ , на рисунке г) – на сайте с номером  $n_0 = 48$ .

Рисунок 10 иллюстрирует примеры движения полярона в цепочке в зависимости от начального положения полярона при одинаковых всех остальных параметрах. Длина цепочки  $N = 101$ , коэффициент трения для всех графиков  $\Gamma = 0.001$ . В качестве начального полярона взята функция вида (5) при  $\xi = 1.5$ , такой полярон уже и выше устоявшегося полярона для заданных параметров цепочки (см. рис. 7 для

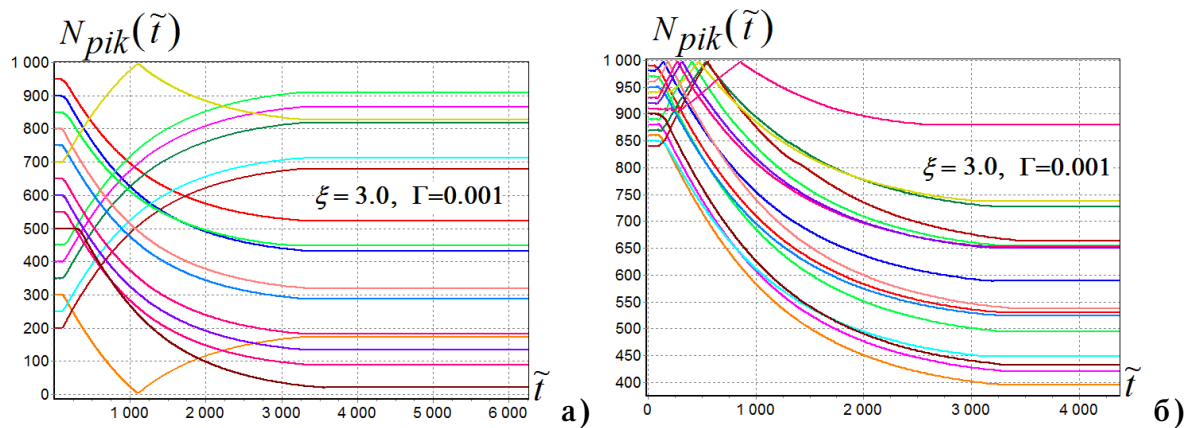
$\xi = 1.5$ ). Центр цепочки находится на сайте с номером  $n_0 = 50$ . На рисунке 10,а показан пример движения полярона, когда полярон, отразившись от одного края цепочки, движется к другому краю, но, не дойдя до середины цепочки, поворачивает в обратную сторону. Следовательно, если мы задали условия, при которых полярон начал движение по цепочке в каком-то направлении, то из этого совсем не следует, что он всегда будет двигаться в этом направлении до края цепочки или до остановки вследствие трения. В зависимости от условий, сложившихся из отражений от концов цепочки смещений сайтов и функций вероятностей распределения заряда, полярон может поменять направление движения в произвольном месте цепочки, а не только вследствие его отражения от конца цепочки. В примере на рисунке 10,б полярон стартует с соседнего сайта по отношению к примеру на рисунке 10,а. Начало движения на рисунке 10,б почти такое же, как и на рисунке 10,а, но затем полярон движется иначе. Из этого примера следует, что центр полярона, двигаясь по цепочке, может на какое-то время остановиться, или немного сдвинуться в обратном направлении, а затем продолжить движение почти с той же скоростью.

Рисунки 10,в и 10,г представляют примеры движения поляронов из соседних начальных положений, а именно, центры начальных поляронов находятся на сайтах с номерами  $n_0 = 47$  и  $n_0 = 48$ . Центр цепочки находится на сайте с номером  $n_0 = 50$ . Если центры начальных поляронов расположены симметрично по отношению к центру цепочки, то поляроны движутся в противоположных направлениях. Но в данном примере центры начальных поляронов находятся с одной стороны от центра цепочки, но, тем не менее, поляроны двигаются в противоположных направлениях.

Представленные выше примеры иллюстрируют движение полярона радиуса  $d(\infty) \approx 4.0$  в коротких цепочках длиной  $N = 25$  и  $N = 101$  сайт. Рассмотрим далее, как двигается такой полярон в более длинной цепочке:  $N = 1001$  сайт. На рисунках 11, 12, 13 показаны графики функции  $N_{pk}(\tilde{t})$ , показывающие положение пика полярона или номер сайта, на котором находится максимум функции  $|c_n(\tilde{t})|^2$ . Так же, как и в случае полярона очень большого радиуса ( $\approx 52$ ), для полярона радиуса  $d(\infty) \approx 4$ , функции  $N_{pk}(\tilde{t})$  и  $X(\tilde{t})$  в длинной цепочке заметно различаются, если начальный полярон находился не в центре цепочки. Разница между этими функциями выражается в том, что функция  $X(\tilde{t})$ , описывающая средневзвешенное положение полярона, показывает смещение полярона в сторону более удалённого конца цепочки относительно положения пика полярона.

На рисунке 11 в качестве начального полярона взята функция вида (5) при  $\xi = 3.0$ , то есть, выбрано начальное поляронное состояние более широкое, нежели устоявшийся полярон (см. рис. 7 для  $\xi = 3.0$ ). На рисунках 11,а и 11,б показано по 16 графиков функции  $N_{pk}(\tilde{t})$ . На рисунке 11,а центры начальных поляронных состояний выбраны последовательно через 50 сайтов от конца цепочки. На рисунке 11,б центры начальных поляронов выбраны ближе к концу цепочки, а именно, последовательно через 10 сайтов от конца. На обоих рисунках хорошо заметно, что во всех представленных случаях, поляроны некоторое время неподвижны, затем начинают двигаться. Существенной зависимости скорости и продолжительности движения от положения начального полярона в цепочке в большинстве случаев не наблюдается. На рисунках 11,а, 12,а, 13,а и 13,б центры начальных поляронов находятся на сайтах с номерами  $n_0 = 1001 - 50 * j$ ,  $j = 1, 16$ , то есть, для  $j = 10$  центр начального полярона находится на сайте с номером  $n_0 = 501$ . Этот сайт находится рядом с центром цепочки, который расположен на сайте с номером  $n = 500$ . На рисунках 11,а и 12,а мы видим, что полярон двигается и в этом случае, причём его скорость и продолжительность движения практически не отличаются от остальных показанных вариантов. Единственное заметное отличие от





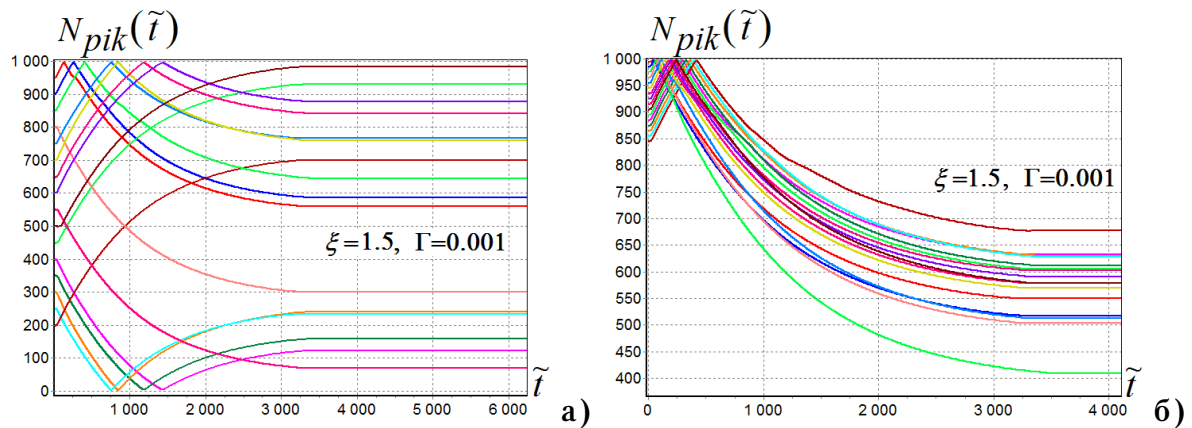
**Рис. 11.** Графики функции  $N_{pik}(\tilde{t})$ , показывающие положение пика полярона. В качестве начального полярона взята функция вида (5) при  $\xi = 3.0$ . Центры начальных поляронов на рисунке а) находятся на сайтах с номерами  $n_0 = 1001 - 50 * j, j = 1, 16$ , на рисунке б) – на сайтах с номерами  $n_0 = 1001 - 10 * j, j = 1, 16$ . Длина цепочки  $N = 1001$  сайт, коэффициент трения  $\Gamma = 0.001$ . Сайты в цепочке считаются от 0 до 1000 ( $N = 1001$  сайт), центр цепочки - сайт с номером 500. Центр начального полярона на рисунке а) для  $j = 10$  находится на сайте с номером  $n_0 = 501$ .

примеров, когда начальный полярон более удалён от центра цепочки, то, что полярон, стартовавший почти из центра цепочки, дольше остаётся неподвижным, но затем двигается как и все остальные. Это можно объяснить тем, что для начального полярона, находящегося почти центре цепочки, отражения его функций вероятностей от разных концов цепочки очень мало различаются и отражения смещений сайтов очень мало различаются. Поэтому требуется больше времени, чтобы накопились несимметричные возбуждения в цепочке, которые способны сдвинуть полярон.

На рисунке 11,б мы видим, что во всех показанных случаях, кроме одного, поляроны начинают двигаться примерно через одинаковые промежутки времени после начала вычислений. Если для полярона, стартовавшего почти из центра цепочки можно найти "простое" объяснение, почему он дольше остальных остаётся неподвижным, то такое объяснение никак не подходит для полярона, представленного на рисунке 11,б, который стартовал из начального положения на сайте с номером  $n_0 = 911, j = 9$ . Сайт с номером  $n_0 = 911$  находится ближе к концу цепочки, чем к центру цепочки. Этот полярон остаётся неподвижным значительно дольше, чем остальные, представленные в этом примере. Как следствие, этот полярон проходит меньшее количество сайтов до своей остановки.

Этот факт можно объяснить тем, что полярон сдвигается из своего начального положения вследствие образующихся в цепочке несимметричных возбуждений, которые складываются из имеющих малые значения отражений смещений сайтов и функций вероятностей. Формирование и поведение этих малых несимметричных возбуждений в цепочке способных сдвинуть полярон зависит, кроме прочих параметров, и от положения начального полярона в конечной цепочке. Причём, образующиеся несимметричные возбуждения могут очень сильно отличаться даже для случаев, когда начальные поляроны находятся на соседних сайтах или на расстоянии нескольких сайтов друг от друга. Выше, на рисунке 10, показаны примеры очень разного движения поляронов, стартовавших из соседних сайтов в короткой цепочке длиной  $N = 101$ . Таким образом показано, что и в коротких, и в длинных цепочках, для начальных поляронов, находящихся не в центре конечной цепочки, реализуются разнообразные

режимы движения, зависящие от многих параметров. Отметим, что зависимость поведения полярона от его начального положения в цепочке не всегда является определяющим фактором.



**Рис. 12.** Графики функции  $N_{pik}(\tilde{t})$ , показывающие положение пика полярона. В качестве начального полярона взята функция вида (5) при  $\xi = 1.5$ . Центры начальных поляронов на рисунке а) находятся на сайтах с номерами  $n_0 = 1001 - 50 * j, j = 1, 16$ , на рисунке б) – на сайтах с номерами  $n_0 = 1006 - 10 * j, j = 1, 16$ . Длина цепочки  $N = 1001$  сайт, коэффициент трения  $\Gamma = 0.001$ .

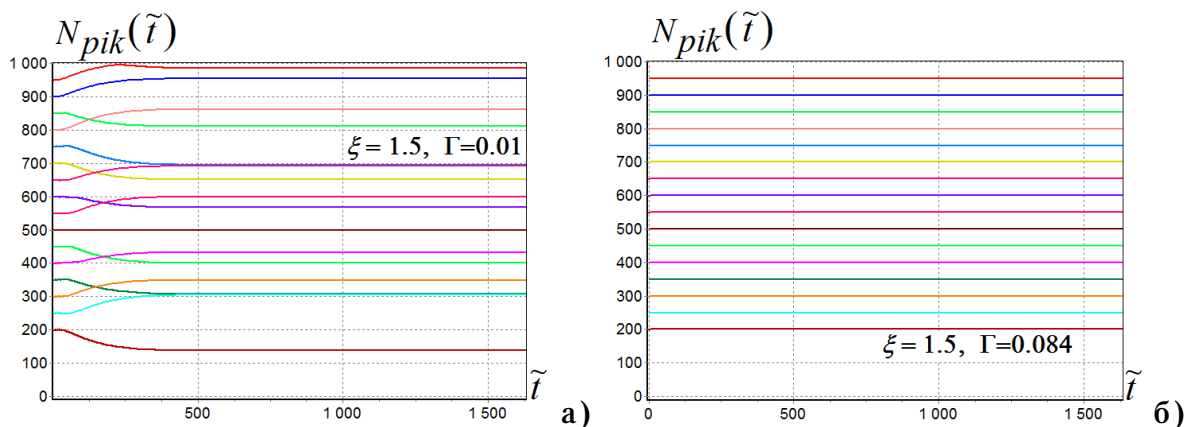
На рисунке 12 в качестве начального поляронного состояния взята функция вида (5) при  $\xi = 1.5$ , то есть начальный полярон более узкий и высокий по сравнению устоявшимся (см. рис. 7 для  $\xi = 1.5$ ). Примеры, представленные на рисунках 12,а и 11,а, отличаются только формой начальных поляронов, или значением коэффициента  $\xi$  для функции (5). Сравнивая эти графики можно увидеть небольшие различия. Более узкие и высокие начальные поляроны (рис. 12,  $\xi = 1.5$ ) начинают двигаться почти сразу после начала вычислений, а более широкие (рис. 11,  $\xi = 3.0$ ) значительно дольше остаются неподвижными. Кроме того, более узкие и высокие поляроны двигаются немного быстрее, нежели широкие. Направления движений в обоих случаях разнообразное. Принципиальной разницы не наблюдается.

Несколько бóльшие различия заметны, если начальные поляроны поместить близко к краю цепочки, см. рис. 11,б,  $\xi = 3.0$  и рис. 12,б,  $\xi = 1.5$ . На рисунке 12,б ( $\xi = 1.5$ ) все поляроны двигаются сначала в одну сторону - к ближайшему краю цепочки, затем отражаются от края и двигаются в противоположном направлении. Поляроны, более широкие, чем устоявшийся полярон, сначала остаются неподвижными достаточно заметное время, затем начинают двигаться в разные стороны, см рис. 11,б.

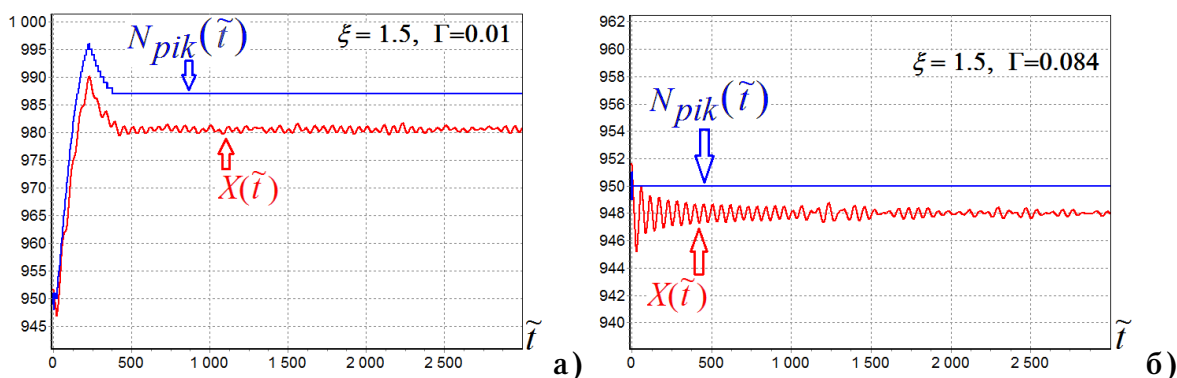
Скорость движения поляронов, представленных на рисунке 12,б не зависит пропорционально от расстояния до ближайшего края цепочки для всех показанных примеров. Таким образом, для длинных цепочек, скорость движения поляронов не зависит от расстояния до края цепочки в двух рассмотренных в данной работе случаях: как для поляронов очень большого радиуса с характерным размером  $d(\infty) = 52.0$ , так и для поляронов с характерным размером  $d(\infty) = 4.0$ .

Три рисунка: рис.12,а, рис. 13,а и рис. 13,б иллюстрируют зависимость поведения полярона от коэффициента трения  $\Gamma$ , все остальные параметры одинаковые во всех трёх случаях. А именно: начальное поляронное состояние представлено функцией вида (5) при  $\xi = 1.5$  (уже и выше устоявшегося), центры начальных поляронов находятся на сайтах с номерами  $n_0 = 1001 - 50 * j, j = 1, 16$ , длина цепочки  $N = 1001$  сайт. Центр цепочки находится на сайте с номером  $n = 500$ . Во всех трёх случаях центр





**Рис. 13.** Графики функции  $N_{pik}(\tilde{t})$ , показывающие положение пика полярона. В качестве начального полярона взята функция вида (5) при  $\xi = 1.5$ . Центры начальных поляронов находятся на сайтах с номерами  $n_0 = 1001 - 50 * j, j = 1, 16$ . Длина цепочки  $N = 1001$  сайт. Коэффициент трения  $\Gamma = 0.01$  на рисунке а) и  $\Gamma = 0.084$  на рисунке б).



**Рис. 14.** Графики функции  $N_{pik}(\tilde{t})$ , показывающие положение пика полярона, и графики функции  $X(\tilde{t})$  показывающие средневзвешенное положение полярона. В качестве начального полярона взята функция вида (5) при  $\xi = 1.5$ . Центры начальных поляронов находятся на сайте с номером  $n_0 = 950, j = 1$ . Длина цепочки  $N = 1001$  сайт. Коэффициент трения  $\Gamma = 0.01$  на рисунке а) и  $\Gamma = 0.084$  на рисунке б).

начального полярона для  $j = 10$  находится на сайте с номером  $n_0 = 501$ , то есть рядом с центром цепочки. И если для маленького трения  $\Gamma = 0.001$  - рис. 12,а, полярон, стартовавший почти из центра цепочки ( $n_0 = 501$ ) движется, то для бóльших значений коэффициента трения  $\Gamma = 0.01$  и  $\Gamma = 0.084$  - рис. 13, поляроны не смещаются из такого же ( $n_0 = 501$ ) начального положения. Рисунок 13 и рисунок 6 похожи, и чтобы не возникло недопонимания напомним, что на рисунке 6 показано, что полярон, стартовавший из центра цепочки (сайт с номером  $n_0 = 1000$ ) остаётся неподвижным и для маленького трения  $\Gamma = 0.001$ . Рисунок 13 и рисунок 6 отличаются тем, что на рисунке 13 нет полярона, находящегося в центре цепочки, здесь показан полярон, который стартовал из соседнего ( $n_0 = 501$ ) с центральным ( $n = 500$ ) сайта, и остался неподвижным.

Из сравнения графиков функции  $N_{pik}(\tilde{t})$  на рис. 12,а,  $\Gamma = 0.001$ , рис. 13,а,  $\Gamma = 0.01$  и рис. 13,б,  $\Gamma = 0.084$  хорошо видна зависимость поведения полярона от коэффициента трения  $\Gamma$ . Мы видим, что с увеличением коэффициента трения, время движения полярона укорачивается и он смещается на меньшее количество сайтов в

цепочке.

На рисунках 14,а и 14,б показаны в увеличенном масштабе по одному графику из рисунков 13,а и 13,б соответственно. В обоих случаях центры начального поляронного состояния вида (5) при  $\xi = 1.5$  находятся на сайте с номером  $n_0 = 950$ .

На рисунке 14,а показаны графики функций  $X(\tilde{t})$  и  $N_{\text{пик}}(\tilde{t})$  в цепочке с коэффициентом трения  $\Gamma = 0.01$ . Графики показывают, что полярон в начале движения совершает небольшие колебания, причём колебания совершает и пик полярона. Затем полярон движется к ближайшему концу цепочки, отражается от него и останавливается. Скорость полярона уменьшается во всё время движения. В процессе движения полярон перемещается примерно на 53 сайта. Приблизительно на такое же расстояние перемещается большинство показанных поляронов на рисунке 13,а. График функции  $X(\tilde{t})$  на рисунке 14,а примерно повторяет график функции  $N_{\text{пик}}(\tilde{t})$ , и после окончания движения показывает, что средневзвешенное положение полярона смещено от положения пика полярона в сторону более удалённого конца цепочки примерно на семь сайтов.

Для  $\Gamma = 0.084$ , рис. 13,б, начальные поляроны не двигаются совсем. Причём, если сравнивать положение пика полярона и средневзвешенное положение полярона, то есть графики функций  $X(\tilde{t})$  и  $N_{\text{пик}}(\tilde{t})$ , то можно заметить, что есть небольшие отличия. На рисунке 14,б,  $\Gamma = 0.084$ , показаны графики функций  $X(\tilde{t})$  и  $N_{\text{пик}}(\tilde{t})$  для полярона, центр которого находился на сайте с номером  $n_0 = 950$  в начальный момент времени. Хорошо заметно, что пик полярона сначала немного смещался - на один сайт в обе стороны, затем вернулся в начальное положение и далее остался неподвижным в своём начальном положении. График функции  $X(\tilde{t})$  показывает затухающие колебания средневзвешенного положения полярона, центр тяжести которого со временем смещается на два сайта от положения пика полярона в сторону более удалённого конца цепочки.

## ВЫВОДЫ

В представленной работе были рассмотрены примеры движения полярона в однородной незамкнутой *polyG/polyC* цепочке ДНК при отсутствии электрического поля на основе модели Пейрарда-Бишопа-Холстейна. Для моделирования мы взяли два различных варианта цепочек. Первый вариант: цепочка с безразмерными параметрами связи электрона и решётки  $\chi_{el} = 8.5$  и  $\chi_h = 0.5$ . Устоявшийся полярон в такой цепочке очень близок к функции вида (5) для  $\xi = 1.0$  (см. рис. 2 и рис. 1) и имеет характерный размер  $d(\infty) \approx 52$ . Это очень широкий полярон, для которого континуальное приближение (4) выполняется очень хорошо. Второй вариант: цепочка с безразмерными параметрами связи электрона и решётки  $\chi_{el} = 42.5$  и  $\chi_h = 2.5$ . Континуальное приближение (4) при таких параметрах выполняется весьма приблизительно, и устоявшийся полярон в этом случае близок к функции вида (5) для  $\xi = 2.0$  (см. рис. 7 и рис. 1). Устоявшийся полярон в такой цепочке имеет характерный размер  $d(\infty) \approx 4.0$ .

Для моделирования поведения полярона в конечной цепочке мы помещали в цепочку начальное поляронное состояние вида (5) при различных значениях коэффициента растяжения  $\xi$ . Изменяя коэффициент растяжения  $\xi$  мы можем подобрать начальный полярон вида (5) максимально близким к устоявшемуся или выбрать начальный полярон уже или шире устоявшегося.

Напомним, что полярон, находящийся в центре конечной цепочки, не сдвигается из своего положения при отсутствии электрического поля. Мы показали, что наименьшей подвижностью обладает устоявшийся начальный полярон. Но и устоявшийся полярон

может двигаться в цепочке с маленьким трением, если в начальный момент времени поместить его достаточно близко к концу цепочки (см. рис.3). Для того, чтобы находящийся в цепочке полярон (устоявшийся или полярон вида (5)) мог двигаться, необходимо выполнение ряда условий.

Мы показали, что способность полярона двигаться и характер этого движения зависит от многих параметров:

- от коэффициента трения в цепочке,
- от длины цепочки,
- от положения полярона в цепочке,
- от формы начального полярона (устоявшийся, близкий к устоявшемуся, уже или шире устоявшегося),
- от характерного размера устоявшегося полярона в цепочке, который обусловлен безразмерными параметрами связи электрона и решётки в цепочке.

Из проведённых вычислений следует, что начальное поляронное состояние вида (5) максимально близкое к устоявшемуся полярону в цепочке, обладает большей способностью к движению по сравнению с устоявшимся поляроном, и значительно меньшей способностью к движению по сравнению с поляроном вида (5), который сформирован уже или шире устоявшегося. Несколько большими возможностями к движению обладает начальное поляронное состояние вида (5), взятое уже (и выше) устоявшегося. К тому же, более узкое поляронное состояние можно расположить ближе к краю цепочки не нарушая его формы и сохраняя условие нормировки  $\sum_n |c_n|^2 = 1$ . Максимально близкое расположение начального поляронного состояния к краю цепочки позволяет придать ему большую скорость движения в коротких цепочках.

Полярон, уже устоявшегося, можно получить из устоявшегося полярона при помощи электрического поля ("прижав" исходный полярон к краю цепочки и отключив поле). При отсутствии электрического поля, можно заставить полярон двигаться, путём формирования в цепочке смещения сайтов (бризеров, бабблов) как угодно близко к полярону. С такими смещениями сайтов полярон может взаимодействовать так же, как и с концом цепочки. Кроме того, для увеличения скорости движения полярона, желательно использовать правильно подобранное смещение сайтов в цепочке для изменения формы полярона, лучше уже устоявшегося, хотя полярон шире устоявшегося, тоже двигается значительно лучше нежели устоявшийся.

Авторы выражают благодарность МСЦ РАН за предоставленные вычислительные ресурсы. Работа поддержана проектами: РФФИ №16-07-00305, РФФИ №16-11-10163.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Murphy C.J., Arkin M.R., Jenkins Y., Ghatlia N.D., Bossmann S.H., Turro N.J., Barton J.K. Long-Range Photo-Induced Electron Transfer through a DNA Helix. *Science*. 1993. V. 262. P. 1025–1029.
2. *Long-Range Charge Transfer in DNA*. Ed. Schuster G.B. Heidelberg: Springer, 2004.
3. Lakhno V.D. *J. Biol. Phys.* 2000. V. 26. P. 133.
4. Fialko N.S., Lakhno V.D. *Phys. Lett. A*. 2000. V. 278. P. 108.
5. Conwell E.M., Rakhmanova S.V. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2000. V. 97. P. 4556.
6. Лакно В.Д., Фиалко Н.С. *Письма ЖЭТФ*. 2003. Т. 78. С. 786–789.
7. Лакно В.Д., Четвериков А.П. *Математическая биология и биоинформатика*. 2014. Т. 9. N. 1. С. 4–19.
8. Korshunova A.N., Lakhno V.D. *Physica E*. 2014. V. 160. P. 206.

9. Maniadis P., Kalosakas G., Rasmussen K.O., Bishop A.R. *Phys. Rev. E*. 2005. V. 72 P. 021912.
10. Goodvin G.L., Mishchenko A.S., Berciu M. *Phys. Rev. Lett.* 2011. V. 107 P. 076403.
11. Maniadis P., Kalosakas G., Rasmussen K.O., Bishop A.R. *Phys. Rev. B*. 2003. V. 68. P. 174304.
12. Peyrard M., Bishop A.R. *Phys. Rev. Lett.* 1989. V. 62. P. 2755–2758.
13. Лахно В.Д., Коршунова А.Н. *Математическая биология и биоинформатика*. 2010. Т. 5. № 1. С. 1–29.

Рукопись поступила в редакцию 02.06.2016.

Дата опубликования 18.07.2016.