

Динамика заряда в процессе его блоховских осцилляций в холстейновских полинуклеотидных цепочках с различными параметрами

Коршунова А.Н.,*, Лахно В.Д.**

*Институт математических проблем биологии РАН - филиал Института прикладной
математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук, Пуцзино, Россия*

Аннотация. В представленной работе мы исследуем характер движения и распределения заряда по цепочке в процессе его блоховских осцилляций в постоянном электрическом поле. Проведённые ранее вычисления показали, что характер движения и распределения заряда по цепочке зависит от всего множества параметров системы. Например, при изменении только напряжённости электрического поля или начального распределения заряда может наблюдаться или равномерное движение, или колебательное, при неизменных остальных параметрах системы. В данной работе моделирование динамики заряда в постоянном электрическом поле проводилось в полинуклеотидных цепочках с различными параметрами частоты колебаний сайтов цепочки и коэффициента трения. Проведённые исследования показали существенные различия скорости и характера движения заряда в цепочках с различными значениями указанных параметров. Естественно, наибольший интерес представляет исследование движения заряда в полинуклеотидных цепочках, параметры которых близки к параметрам цепочек ДНК. Но численное моделирование динамики заряда в таких цепочках, как правило, более затратно по вычислительным ресурсам. Поэтому, для ускорения проводимых вычислений, сначала моделирование проводится в цепочках с более удобными параметрами. Показано, что в цепочках, с параметрами близкими к параметрам цепочек ДНК, заряд может только незначительно перемещаться по цепочке, осциллируя в области своего начального положения. При модельных значениях частоты колебаний сайтов цепочки и коэффициента трения, которые значительно превышают соответствующие значения параметров цепочек ДНК, заряд может продвигаться по цепочке на достаточно большое расстояние.

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

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время изучению механизмов электронного транспорта в полинуклеотидных цепочках посвящено большое количество теоретических [1]–[11] и экспериментальных [12]–[19]. Множество исследований направлено на изучение такого интересного явления, как блоховские осцилляции [20]–[26], которые наблюдаются во многих экспериментальных случаях [27]–[38].

В представленной работе проведено исследование характера движения и

*alya@impb.ru

**lak@impb.ru

распределения заряда в дискретной молекулярной цепочке. Моделирование движения заряда проведено при наличии постоянного электрического поля на основе модели Холстейна [40, 41]. Ранее проведенные исследования [42]–[47] показывают, что в рассматриваемой системе могут реализоваться сложные динамические режимы, которые зависят от множества всех выбранных параметров системы: от частоты колебаний сайтов цепочки, от коэффициента трения, от длины цепочки, от константы связи электрона и решётки в цепочке, от напряжённости электрического поля. Показано также [43], что, изменяя только начальное распределение заряда и величину напряжённости электрического поля, можно наблюдать самые разнообразные режимы движения и распределения заряда в цепочке.

В данной работе численное моделирование движения заряда в постоянном электрическом поле проводилось в полинуклеотидных цепочках с различными значениями частоты колебаний сайтов цепочки и коэффициента трения, а также при различных значениях напряжённости электрического поля. Для моделирования использовались четыре варианта значений частоты колебаний сайтов цепочки и коэффициента трения. Самые маленькие значения совпадают с соответствующими значениями параметров цепочек ДНК.

Проведённые вычисления показали, что характер движения заряда в цепочках, с параметрами близкими к параметрам цепочек ДНК, значительно отличается от характера движения заряда в цепочках с большими значениями частоты колебаний сайтов и коэффициента трения. Особенно значительные различия в динамике смещений сайтов в цепочках с различными значениями указанных параметров.

Динамические графики, которые наглядно демонстрируют распределение электронной плотности заряда и соответствующие смещения сайтов цепочки, представлены в презентации к данной статье, см. [презентацию](#).

ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИСКРЕТНОЙ ХОЛСТЕЙНОВСКОЙ ЦЕПОЧКИ

Динамика заряда при наличии постоянного внешнего поля в однородной молекулярной цепочке моделируется системой связанных квантово-классических динамических уравнений с диссипацией. В используемой нами модели ДНК рассматривается как однородная цепочка, составленная из N сайтов. Каждый сайт представляет собой нуклеотидную пару, которая рассматривается как гармонический осциллятор [39]. Для моделирования динамики квантовой частицы в цепочке из N нуклеотидных пар будем использовать гамильтониан Холстейна, в котором каждая нуклеотидная пара выполняет роль двухатомной молекулы [40, 41]:

$$\hat{H} = - \sum_n^N \nu (|n\rangle\langle n-1| + |n\rangle\langle n+1|) + \sum_n^N \alpha q_n |n\rangle\langle n| + \sum_n^N M \dot{q}_n^2 / 2 + \sum_n^N k q_n^2 / 2 + \sum_n^N e \mathcal{E} n |n\rangle\langle n|, \quad (0.1)$$

где ν – матричный элемент перехода заряда между соседними сайтами (нуклеотидными парами), α – константа взаимодействия заряда со смещениями q_n , M – эффективная масса сайта, k – упругая постоянная, e – заряд электрона, $\mathcal{E}$ – напряжённость электрического поля.

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

$$i\hbar \dot{b}_n = -\nu(b_{n-1} + b_{n+1}) + \alpha q_n b_n + e\mathcal{E} a n b_n, \quad (0.2)$$

$$M \ddot{q}_n = -\gamma \dot{q}_n - k q_n - \alpha |b_n|^2, \quad (0.3)$$

где b_n – амплитуда вероятности нахождения заряда на n -м сайте, $\sum_n |b_n|^2 = 1$, $\hbar = h/2\pi$, h – постоянная Планка. В классические уравнения движения (0.3) введена диссипация, определяемая коэффициентом трения γ .

Уравнения (0.2) являются уравнениями Шрёдингера для амплитуд вероятностей b_n , описывающими эволюцию частицы в деформируемой цепочке. Уравнения (0.3) представляют классические уравнения движения, описывающие динамику нуклеотидных пар с учётом диссипации.

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

$$\begin{aligned}\eta &= \tau\nu/\hbar, \quad \omega^2 = \tau^2 K/M, \\ \omega' &= \tau\gamma/M, \quad q_n = \beta u_n, \quad E = \mathcal{E}e\alpha\tau/\hbar, \\ \kappa\omega^2 &= \tau^3(\alpha)^2/M\hbar, \quad \beta = \tau^2\alpha/M, \quad t = \tau\tilde{t},\end{aligned}\quad (0.4)$$

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

В безразмерных переменных (0.4) уравнения (0.2), (0.3) примут вид:

$$i\frac{db_n}{d\tilde{t}} = -\eta(b_{n+1} + b_{n-1}) + \kappa\omega^2 u_n b_n + E n b_n, \quad (0.5)$$

$$\frac{d^2 u_n}{d\tilde{t}^2} = -\omega' \frac{du_n}{d\tilde{t}} - \omega^2 u_n - |b_n|^2, \quad (0.6)$$

где b_n – амплитуды вероятности локализации заряда на n -ом сайте, 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 – напряжённость электрического поля, $\tilde{t} = t/\tau$, $\tau = 10^{-14}$ сек (произвольный масштаб времени).

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

В представленной работе мы исследуем динамику заряда в постоянном электрическом поле в однородной незамкнутой цепочке, которая имеет два конца.

Система нелинейных дифференциальных уравнений (0.5), (0.6) решается методом (а) – типа Рунге – Кутты четвёртого порядка.

НАЧАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

При выборе цепочек для моделирования движения заряда в постоянном электрическом поле наибольший интерес представляют цепочки, параметры которых близки к параметрам цепочек ДНК. В данном исследовании использовались цепочки, параметры которых близки к параметрам *PolyG/PolyC* цепочки ДНК, см. [48, 49]: $\alpha = 0.13 \text{ eV}/\text{\AA}$, $\gamma = 6 \cdot 10^{-10} \text{ g/sec}$, $M = 10^{-21} \text{ g}$, $k = 0.062 \text{ eV}/\text{\AA}^2$, $\nu = \nu_{CG} = 0.084 \text{ eV}$. *PolyG/PolyC* цепочке соответствуют следующие значения безразмерных параметров: $\kappa = 4$, $\eta = 1.276$, $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$.

Для моделирования движения полярона в постоянном электрическом поле мы помещали в цепочку начальное поляронное состояние в виде обратного гиперболического

косинуса:

$$|b_n(0)| = \frac{\sqrt{2}}{4} \sqrt{\frac{\kappa}{|\eta|}} \operatorname{ch}^{-1} \left(\frac{\kappa(n - n_0)}{4|\eta|} \right), \quad (0.7)$$

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

Функция вида (0.7) соответствует стационарному решению уравнений (0.1), (0.2) в отсутствие внешнего поля. Полярное состояние вида (0.7) практически совпадает с численным устоявшимся полярном в заданной цепочке для широких полярнов. Для узких полярнов наблюдаются отличия. Устоявшимся мы называем полярон, который не изменяет своей формы и не сдвигается из своего начального положения при отсутствии внешних возбуждений и электрического поля. В данной работе были использованы цепочки с такими значениями параметров, при которых начальное полярное состояние вида (0.7) почти не отличается от численного устоявшегося полярона в выбранной цепочке.

PolyG/PolyC цепочке ДНК соответствуют значения: $\kappa = 4$, $\eta = 1.276$. Так как при таких параметрах полярон вида (0.7) значительно отличается от устоявшегося полярона в цепочке, мы использовали цепочку с безразмерным значением константы связи $\kappa = 1$. В этом случае полярон вида (0.7) практически совпадает с численным устоявшимся полярном в цепочке, в такой цепочке удобнее проводить моделирование, а полученные результаты можно воспроизвести и для цепочки с константой связи $\kappa = 4$.

Таким образом, для моделирования движения заряда в электрическом поле были выбраны следующие значения безразмерных параметров: $\kappa = 1$, $\eta = 1.276$. Численное моделирование было выполнено для четырёх вариантов значений частоты колебаний сайтов цепочки и коэффициента трения. Первый вариант значений соответствует значениям параметров цепочки ДНК: $\omega = 0.01$, $\omega' = 0.006$. Второй вариант: $\omega = 0.05$, $\omega' = 0.01$, третий: $\omega = 0.25$, $\omega' = 0.5$, четвёртый: $\omega = 1$, $\omega' = 1$.

Центр начального заряда вида (0.7) мы помещали на сайт цепочки с номером n_0 , значение которого выбиралось так, чтобы в начале вычислений заряд был достаточно далеко от концов цепочки. Аналогично и длина цепочки подбирались так, чтобы и в конце вычислений заряд не подошел слишком близко к концу цепочки. Поле включается "мгновенно" в начальный момент времени.

Во всех представленных далее примерах, сайты в цепочке пронумерованы слева направо. Так как значения напряжённости электрического поля мы задаём положительными: $\tilde{E} > 0$, то заряды двигаются по цепочке справа налево, в направлении поля. Поэтому значения n_0 (положения начального полярного состояния) задаются вблизи правого конца цепочки.

БЛОХОВСКИЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ ЗАРЯДА В ЦЕПОЧКАХ С РАЗЛИЧНЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

Проведённые ранее исследования показали, что в постоянном электрическом поле существует возможность равномерного движения заряда на очень большие расстояния для небольших значений напряжённости электрического поля [42], [43]. С увеличением значения напряжённости электрического поля уменьшается продолжительность равномерного движения, затем заряд переходит в колебательный режим движения с блоховскими осцилляциями. При выбранных в данной работе значениях напряжённости электрического поля, заряд сразу переходит в колебательный режим движения, то есть задаются такие значения напряжённости электрического поля, которые существенно превосходят допустимые значения для существования равномерного движения.

На рисунке 1 показаны графики функций $X(\tilde{t})$ и $|b_n(\tilde{t})|^2$ в процессе блоховских осцилляций заряда в постоянном электрическом поле напряжённостью $E = 0.05$ в начальный период движения. Примеры на рисунках 1a и 1b различаются только значениями частоты колебаний сайтов и коэффициента трения. На рисунке 1a заданы большие значения параметров ω и ω' : $\omega = 1$ и $\omega' = 1$. На рисунке 1b значения параметров ω и ω' соответствуют значениям параметров цепочки ДНК: $\omega = 0.01$ и $\omega' = 0.006$. Центр начального заряда вида (0.7) мы помещали на сайт цепочки с номером $n_0 = 300$, длина цепочки $N = 351$.

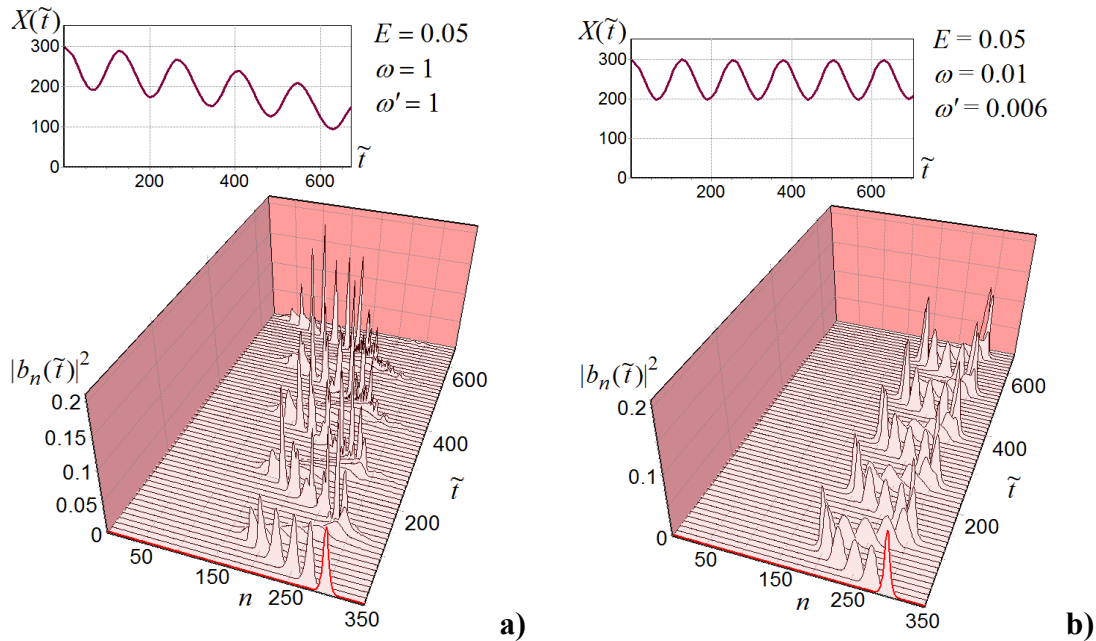


Рис. 1. Графики функций $X(\tilde{t})$ и $|b_n(\tilde{t})|^2$ в процессе блоховских осцилляций заряда в постоянном электрическом поле напряжённостью $E = 0.05$. Параметры цепочек $\kappa = 1, \eta = 1.276$. Длина цепочки $N = 351$ сайт, центр заряда вида (0.7) в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 300$. На рисунке **a**: $\omega = 1, \omega' = 1$; на рисунке **b**: $\omega = 0.01$ и $\omega' = 0.006$

Для заданного значения напряжённости электрического поля $E = 0.05$ период блоховских осцилляций $T_{BL} = 2\pi/E \approx 125$, блоховская амплитуда $A_{BL} = 4\eta/E \approx 102$. Все графики, представленные на рисунке 1 наглядно демонстрируют, что теоретические характеристики блоховских осцилляций приблизительно соблюдаются. Графики функций $X(\tilde{t})$ и $|b_n(\tilde{t})|^2$ на рисунке 1 наглядно демонстрируют, что в первый блоховский период, в самом начале движения, заряд смещается по сайтам в направлении поля на расстояние примерно равное блоховской амплитуде для заданного значения напряжённости электрического поля. Затем заряд возвращается к начальному положению, и далее совершает колебательные движения продвигаясь по цепочке в направлении поля. В зависимости от параметров системы, заряд сразу или постепенно теряет свою форму. При больших значениях параметров $\omega = 1$ и $\omega' = 1$ заряд теряет свою первоначальную форму в первый блоховский период. При маленьких значениях, $\omega = 0.01$ и $\omega' = 0.006$, заряд хорошо сохраняет первоначальную форму в течение нескольких периодов. Из графиков на рисунке 1a следует, что при больших значениях параметров $\omega = 1$ и $\omega' = 1$, заряд уже в начальный период времени заметно продвинулся по цепочке. При маленьких значениях $\omega = 0.01$ и $\omega' = 0.006$ на рисунке 1b, заряд совершает блоховские осцилляции, оставаясь практически на месте в пределах одной блоховской амплитуды около начального положения заряда. Такую же зависимость от значений ω и

ω' демонстрируют графики функций $X(\tilde{t})$ на рисунке 2.

На рисунке 2 показаны графики функций $X(\tilde{t})$ для четырёх различных пар значений параметров ω и ω' . Задана та же самая напряжённость электрического поля, что и в примерах на рисунке 1. В данном примере моделирование движения заряда выполнено для большого промежутка времени, примерно 40000 безразмерного времени $\tilde{t}$.

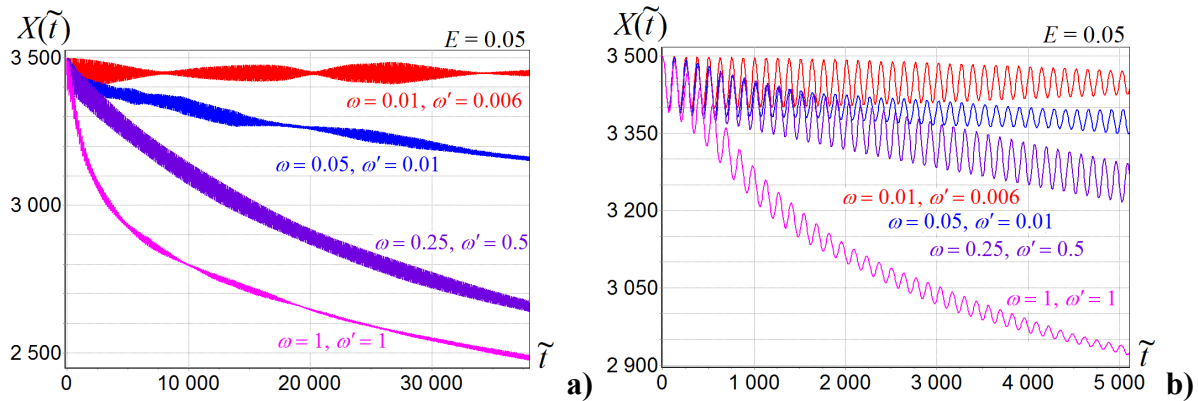


Рис. 2. Графики функций $X(\tilde{t})$ в процессе движения заряда в цепочках с различными значениями параметров ω и ω' . Параметры цепочек $\kappa = 1, \eta = 1.276$. Напряжённость электрического поля $E = 0.05$, длина цепочки $N = 4001$ сайт, центр заряда в начальный момент времени находится на сайте цепочки с номером $n_0 = 3500$. На рисунке **b** показан начальный участок графика рисунка **a**

Графики функций $X(\tilde{t})$ на рисунке 2 показывают, что с увеличением значений частоты колебаний сайтов цепочки ω и коэффициента трения ω' , скорость продвижения заряда по цепочке увеличивается. При этом период блоховских осцилляций заряда почти одинаковый (см. рис. 2b) при всех заданных значениях ω и ω' , период зависит, прежде всего, от значения напряжённости электрического поля, $T_{BL} = 2\pi/E$.

На рисунке 1 показаны графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$, амплитуды вероятности нахождения заряда на n -м сайте, но не показаны соответствующие им смещения сайтов, графики функций u_n . Динамика смещений сайтов для указанных значений ω и ω' представлена в презентации к статье, так как на стационарных графиках сложно показать движение сайтов цепочки в процессе блоховских осцилляций заряда, см. [презентацию](#).

На рисунке 3 показаны четыре графика функций $X(\tilde{t})$ для выбранных четырёх пар значений параметров ω и ω' и шести различных значений напряжённости электрического поля на каждом из четырёх графиков. Длина цепочек в примерах на рисунке 3 разная, и начальные положения заряда вида (0.7) тоже различные. Представленные графики наглядно демонстрируют, что для различных значений напряжённости электрического поля, скорость перемещения заряда по цепочке возрастает с увеличением значений ω и ω' . Причём, при больших значениях ω и ω' на рисунках 3a и 3b, скорость перемещения заряда по цепочке уменьшается при увеличении значения напряжённости электрического поля E . При меньших значениях ω и ω' , на рисунках 3c и 3d, такой прямой зависимости от значения напряжённости поля E не наблюдается. Но при всех значениях напряжённости электрического поля E , в первый блоховский период в начале движения, заряд смещается по цепочке на расстояние одной блоховской амплитуды. Это хорошо видно на рисунке 3d. Для напряжённости электрического поля $E = 0.042$ амплитуда блоховских осцилляций $A_{BL} = 4\eta/E \approx 121$, для $E = 0.042 - A_{BL} \approx 82$.

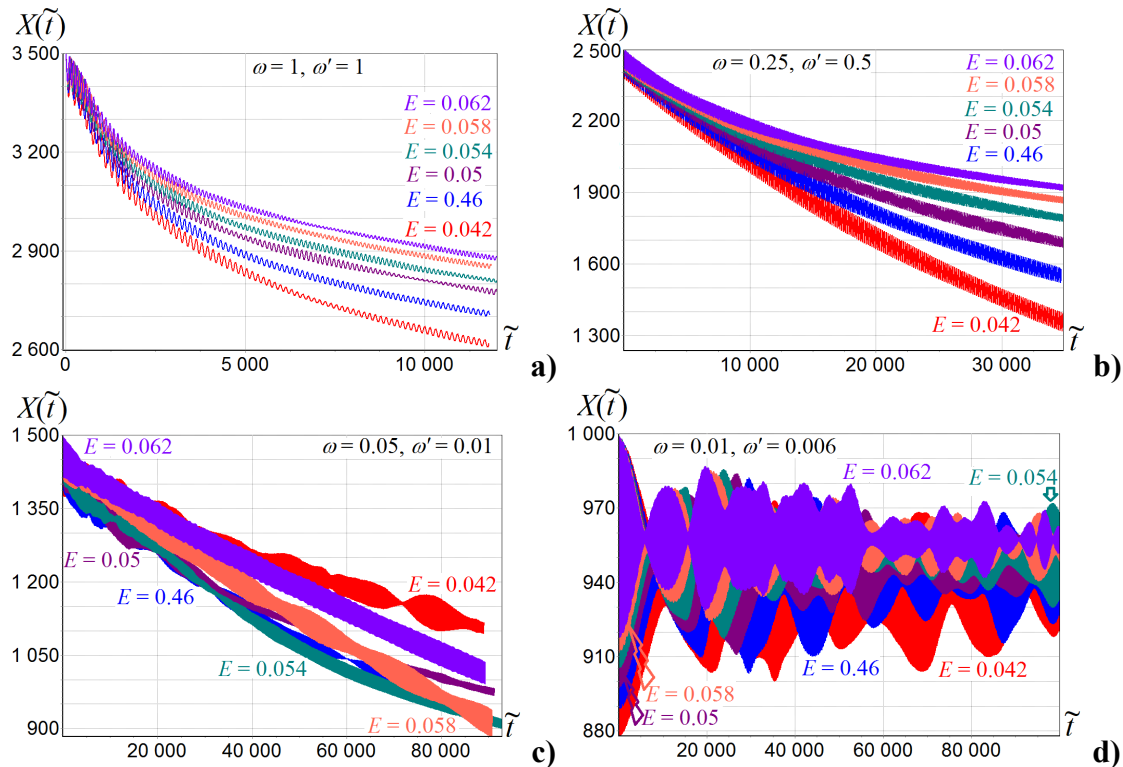


Рис. 3. Графики функций $X(\tilde{t})$ в процессе блоховских осцилляций заряда в цепочках с различными значениями параметров ω и ω' и для различных значений напряжённости электрического поля. Задано шесть значений напряжённости электрического поля: $E = 0.042, E = 0.046, E = 0.05, E = 0.054, E = 0.058, E = 0.062$. Параметры цепочек $\kappa = 1, \eta = 1.276$. На рисунке **a** длина цепочки $N = 4001$ сайт, $n_0 = 3500, \omega = 1, \omega' = 1$. На рисунке **b** $N = 3001$ сайт, $n_0 = 2500, \omega = 0.25, \omega' = 0.5$. На рисунке **c** $N = 2001$ сайт, $n_0 = 1500, \omega = 0.05, \omega' = 0.01$. На рисунке **d** $N = 1501$ сайт, $n_0 = 1000, \omega = 0.01, \omega' = 0.006$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе представлены характерные примеры движения и распределения заряда в холстейновской цепочке для четырёх пар значений частоты колебаний сайтов цепочки и коэффициента трения. Один из вариантов указанных значений соответствует параметрам цепочки ДНК, а именно: $\omega = 0.01, \omega' = 0.006$. Показано, что при таких параметрах, заряд практически не смещается по цепочке и совершает блоховские осцилляции около своего начального положения в пределах одной блоховской амплитуды, см. рис. 1b и 3d. С увеличением значений частоты колебаний сайтов цепочки и коэффициента трения увеличивается скорость перемещения заряда по цепочке. Причём, на всём протяжении вычислений и при всех заданных параметрах цепочки и напряжённости электрического поля, заряд совершает осцилляции, период которых близок к теоретическому периоду блоховских осцилляций: $T_{BL} = 2\pi/E$.

Общей характерной чертой поведения заряда во всех представленных примерах является то, что заряд смещается по цепочке практически точно на расстояние одной блоховской амплитуды в самом начале движения в первый блоховский период, это хорошо видно на всех рисунках. В цепочке, параметры которой близки к параметрам цепочки ДНК, заряд достаточно долго совершает осцилляции, сохраняя свою первоначальную форму, см. рис. 1b.

При больших значениях частоты колебаний сайтов цепочки и коэффициента трения,

$\omega = 1$, $\omega' = 1$, заряд уже в первом периоде теряет первоначальную форму, но при этом достаточно быстро перемещается по цепочке, совершая блоховские осцилляции, см. рис. 1а. При таких больших значениях параметров ω , ω' , графики смещений сайтов u_n практически повторяют графики функций $|b_n(\tilde{t})|^2$. Такого соответствия, или почти повторения, графиков смещений сайтов u_n и функций $|b_n(\tilde{t})|^2$ не наблюдается при меньших значениях параметров ω , ω' .

При небольших значениях параметров ω , ω' , область смещения сайтов цепочки u_n из их равновесных положений, соответствует области ненулевых значений функций $|b_n(\tilde{t})|^2$. Но динамика смещений сайтов цепочки и динамика плотности распределения волновой функции сильно различаются, см. [презентацию](#).

Вычисления проведены с помощью гибридного суперкомпьютера K60, установленного в Суперкомпьютерном центре коллективного пользования ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Morais D., Dias W.S. Investigating charge mobility of alternating copolymers: The role of comonomers and electron-lattice interaction. *Synthetic Metals*. 2025. V. 312. Article No. 117861. doi: [10.1016/j.synthmet.2025.117861](https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2025.117861)
2. Сюракшин А.В., Лахно В.Д., Юшанхай В.Ю. Компьютерное моделирование переноса заряда в молекуле ДНК в рамках простой модели открытой квантовой системы. *Математическая биология и биоинформатика*. 2024. Т. 19. № 1. С. 212–231. doi: [10.17537/2024.19.212](https://doi.org/10.17537/2024.19.212)
3. Huang Z., Chen L., Zhou N., Zhao Y. Transient dynamics of a one-dimensional Holstein polaron under the influence of an external electric field. *Ann. Phys.* 2017. V. 529. No. 5. Article No. 1600367. doi: [10.1002/andp.201600367](https://doi.org/10.1002/andp.201600367)
4. Виноградов Г.А., Лахно В.Д. О переносе заряда в ДНК. *Математическая биология и биоинформатика*. 2025. Т. 20. № 2. С. 269–286. doi: [10.17537/2025.20.269](https://doi.org/10.17537/2025.20.269)
5. Ojeda J.H., Lima R.P.A., Domínguez-Adame F., Orellana P.A. Trapping and motion of polarons in weakly disordered DNA molecules. *J. Phys.: Condens. Matter*. 2009. V. 21. Article No. 285105. doi: [10.1088/0953-8984/21/28/285105](https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/28/285105)
6. 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](https://doi.org/10.1016/j.physe.2014.02.025)
7. Rawtani D., Kuntmal B., Agrawal Y. Charge transfer in DNA and its diverse modelling approaches. *Frontiers in Life Science*. 2016. V. 9. No. 3. P. 214–225. doi: [10.1080/21553769.2016.1207570](https://doi.org/10.1080/21553769.2016.1207570)
8. 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](https://doi.org/10.1007/b94477)
9. Taniguchi M., Kawai T. DNA electronics. *Physica E*. 2006. V. 33. P. 1–12. doi: [10.1016/j.physe.2006.01.005](https://doi.org/10.1016/j.physe.2006.01.005)
10. *Nanobioelectronics - for Electronics, Biology and Medicine*. Eds. A. Offenhäusser, R. Rinaldi. Springer, 2009. doi: [10.1007/978-0-387-09459-5](https://doi.org/10.1007/978-0-387-09459-5)
11. Zhao Y. The hierarchy of Davydov's Ansätze: From guesswork to numerically "exact" many-body wave functions. *J. Chem. Phys.* 2023. V. 158. Article No. 080901. doi: [10.1063/5.0140002](https://doi.org/10.1063/5.0140002)
12. Kolbeck P.J., Tišma M., Analikwu B.T., Vanderlinden W., Dekker C., Lipfert J. Supercoiling-dependent DNA binding: quantitative modeling and applications to bulk and single-molecule experiments. *Nucleic Acids Research*. 2024. V. 52. No. 1. P. 59–72. doi: [10.1093/nar/gkad1055](https://doi.org/10.1093/nar/gkad1055)
13. Porath D., Bezryadin A., De Vries S., Dekker C. Direct measurement of electrical

- transport through DNA molecules. *Nature*. 2000. V. 403. No. 6770. P. 635–638. doi: [10.1038/35001029](https://doi.org/10.1038/35001029)
14. 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](https://doi.org/10.1021/ja983092p)
 15. Fink H.-W., Schönenberger C. Electrical conduction through DNA molecules. *Nature*. 1999. V. 398. No. 6726. P. 407–410. doi: [10.1038/18855](https://doi.org/10.1038/18855)
 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. No. 6791. P. 51–53. doi: [10.1038/35017524](https://doi.org/10.1038/35017524)
 17. Lewis F.D., Young R.M., Wasielewski M.R. Tracking photoinduced charge separation in DNA: from start to finish. *Acc. Chem. Res.* 2018. V. 51. No. 8. P. 1746–1754. doi: [10.1021/acs.accounts.8b00090](https://doi.org/10.1021/acs.accounts.8b00090)
 18. Tse E.C.M., Zwang T.J., Bedoya S, Barton J.K. Effective distances for DNA-mediated charge transport between repair proteins. *ACS Central Sci.* 2019. V. 5. No. 1. P. 65–72. doi: [10.1021/acscentsci.8b00566](https://doi.org/10.1021/acscentsci.8b00566)
 19. 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. No. 5136. P. 1025–1029. doi: [10.1126/science.7802858](https://doi.org/10.1126/science.7802858)
 20. Bloch F. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. *Z. Phys.* 1928. V. 52. P. 555–600.
 21. Zener C. *Proc. R. Soc. London. Series A*. 1932. V. 145. P. 523.
 22. Lakhno V.D., Fialko N.S. Bloch oscillations in a homogeneous nucleotide chain. *Jetp Lett.* 2004. V. 79. P. 464–467. doi: [10.1134/1.1780553](https://doi.org/10.1134/1.1780553)
 23. Li Y., Liu X., Fu J., Liu D., Xie S., Mei L. Bloch oscillations in a one-dimensional organic lattice. *Phys. Rev. B*. 2006. V. 74. Article No. 184303. doi: [10.1103/PhysRevB.74.184303](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.184303)
 24. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Bloch oscillations of a soliton in a molecular chain. *Euro. Phys. J. B* 2007. V. 55. P. 85–87. doi: [10.1140/epjb/e2007-00045-3](https://doi.org/10.1140/epjb/e2007-00045-3)
 25. Díaz E., Lima R.P.A., Domínguez-Adame F. Bloch-like oscillations in the Peyrard-Bishop-Holstein model. *Phys. Rev. B*. 2008. V. 78. Article No. 134303. doi: [10.1103/PhysRevB.78.134303](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.134303)
 26. Buarque A.R.C., Lyra M.L., Dias W.S. Bloch-like superoscillations and unidirectional motion of phase-driven quantum walkers. *Phys. Rev. A*. 2021. V. 103. Article No. 012222. doi: [10.1103/PhysRevA.103.012222](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.103.012222)
 27. Feldmann J., Leo K., Shah J., Miller D.A.B., Cunningham J.E., Meier T., von Plessen G., Schulze A., Thomas P., Schmitt-Rink S. Optical investigation of Bloch oscillations in a semiconductor superlattice. *Phys. Rev. B*. 1992. V. 46. P. 7252(R)–7255(R). doi: [10.1103/PhysRevB.46.7252](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.7252)
 28. Leisching P., Haring Bolivar P., Beck W., Dhaibi Y., Brüggemann F., Schwedler R., Kurz H., Leo K., Köhler K. Bloch oscillations of excitonic wave packets in semiconductor superlattices. *Phys. Rev. B*. 1994. V. 50. P. 14389–14404. doi: [10.1103/PhysRevB.50.14389](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.14389)
 29. Morandotti R., Peschel U., Aitchison J.S., Eisenberg H.S., Silberberg K. Experimental observation of linear and nonlinear optical Bloch oscillations. *Phys. Rev. Lett.* 1999. V. 83. P. 4756–4759. doi: [10.1103/PhysRevLett.83.4756](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.83.4756)
 30. Block A., Etrich C., Limboeck T., Bleckmann F., Soergel E., Rockstuhl C., Linden S. Bloch oscillations in plasmonic waveguide arrays. *Nature Commun.* 2014. V. 5. Article No. 3843. doi: [10.1038/ncomms4843](https://doi.org/10.1038/ncomms4843)
 31. Xu Y.-L., Fegadolli W.S., Gan L., Lu M.-H., Liu X.-P., Li Z.-Y., Scherer A., Chen Y.-F. Experimental realization of Bloch oscillations in a parity-time synthetic silicon photonic lattice. *Nature Commun.* 2016. V. 7. Article No. 11319. doi: [10.1038/ncomms11319](https://doi.org/10.1038/ncomms11319)

32. Unuma Takeya, Itagaki Yuto, Asakura Soichiro. Room-temperature Bloch oscillations and interminiband Zener tunneling in a GaAs-based narrow-minigap superlattice. *Appl. Phys. Express*. 2021. V. 14. Article No. 081003. doi: [10.35848/1882-0786/ac114f](https://doi.org/10.35848/1882-0786/ac114f)
33. Ferrari G., Poli N., Sorrentino F., Tino G.M. Long-lived Bloch oscillations with bosonic Sr atoms and application to gravity measurement at the micrometer scale. *Phys. Rev. Lett.* 2006. V. 97. Article No. 060402. doi: [10.1103/PhysRevLett.97.060402](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.060402)
34. Geiger Z.A., Fujiwara K.M., Singh K., Senaratne R., Rajagopal S.V., Lipatov M., Shimasaki T., Driben R., Konotop V.V., Meier T., Weld D.M. Observation and uses of position-space Bloch oscillations in an ultracold gas. *Phys. Rev. Lett.* 2018. V. 120. Article No. 213201. doi: [10.1103/PhysRevLett.120.213201](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.213201)
35. Wilkinson S.R., Bharucha C.F., Madison K.W., Qian Niu, Raizen M.G. Observation of atomic Wannier-Stark ladders in an accelerating optical potential. *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 76. P. 4512–4515. doi: [10.1103/PhysRevLett.76.4512](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.4512)
36. Ben Dahan M., Peik E., Reichel J., Castin Y., Salomon C. Bloch oscillations of atoms in an optical potential. *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 76. P. 4508–4511. doi: [10.1103/PhysRevLett.76.4508](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.4508)
37. Dreisow F., Szameit A., Heinrich M., Pertsch T., Nolte S., Tünnermann A., Longhi S. Bloch-Zener oscillations in binary superlattices. *Phys. Rev. Lett.* 2009. V. 102. Article No. 076802. doi: [10.1103/PhysRevLett.102.076802](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.076802)
38. Lanzillotti-Kimura N.D., Fainstein A., Perrin B., Jusserand B., Mauguin O., Largeau L., Lemaître A. Bloch oscillations of THz acoustic phonons in coupled nanocavity structures. *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 104. Article No. 197402. doi: [10.1103/PhysRevLett.104.197402](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.197402)
39. 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](https://doi.org/10.1023/A:1005275211233)
40. 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](https://doi.org/10.1016/0003-4916(59)90002-8)
41. 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](https://doi.org/10.1016/0003-4916(59)90003-X)
42. 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. 147–151. doi: [10.1140/epjb/e2010-10565-2](https://doi.org/10.1140/epjb/e2010-10565-2)
43. 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](https://doi.org/10.21883/JTF.2018.09.46414.14-18)
44. 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)
45. 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](https://doi.org/10.17537/2022.17.452)
46. Korshunova A.N., Lakhno V.D. Internal dynamics of a polaron uniformly moving along a molecular chain in a constant electric field. *Chaos, Solitons and Fractals*. 2024. V. 182. Article No. 114786. doi: [10.1016/j.chaos.2024.114786](https://doi.org/10.1016/j.chaos.2024.114786)
47. Korshunova A.N., Lakhno V.D. Bloch internal dynamics of a polaron uniformly moving in a constant electric field along molecular chains of various lengths. *Chaos, Solitons and Fractals*. 2025. V. 191. Article No. 115930. doi: [10.1016/j.chaos.2024.115930](https://doi.org/10.1016/j.chaos.2024.115930)
48. Lakhno V.D., Fialko N.S. HSSH-model of hole transfer in DNA. *Eur. Phys. J. B*. 2005. V. 43.

P. 279–281. doi: [10.1140/epjb/e2005-00049-y](https://doi.org/10.1140/epjb/e2005-00049-y)

49. Lakhno V.D., Fialko N.S. Solvation effects on hole mobility in the poly G/Poly C duplex. *Russ. J. Phys. Chem. A*. 2012. V. 86. P. 832–836. doi: [10.1134/S0036024412050196](https://doi.org/10.1134/S0036024412050196)

Рукопись поступила в редакцию 16.06.2026.

Переработанный вариант поступил 26.06.2026.

Дата опубликования 27.06.2026.

Dynamics of Charge during Its Bloch Oscillations in Holstein Polynucleotide Chains with Different Parameters

Korshunova A.N., Lakhno V.D.

*Institute of Mathematical Problems of Biology RAS, Keldysh Institute of Applied Mathematics
of Russian Academy of Sciences, Pushchino, Russia*

Abstract. In the work presented, we study the nature of motion and distribution of charge along a chain during its Bloch oscillations in a constant electric field. Previous calculations have shown that the nature of the charge motion and distribution along the chain depends on the entire set of system parameters. For example, if only the intensity of an electric field or the initial charge distribution is changed, there may be either uniform motion or oscillatory motion when all other parameters of the system remain unchanged. In this work, the modeling of charge dynamics in a constant electric field was carried out in polynucleotide chains with different parameters of the oscillation frequency of chain sites and the friction coefficient. The conducted researches showed significant differences in the velocity and nature of charge motion in chains with different values of the specified parameters. Obviously, the study of charge motion in polynucleotide chains, whose parameters are close to those of DNA chains, is of the greatest interest. But numerical modeling of the charge dynamics in such chains tends to be more costly for computational resources. Therefore, in order to speed up the computations carried out, modelling is first performed in chains with more convenient parameters. It has been shown that in chains with parameters close to those of DNA chains, the charge can only move slightly along the chain, oscillating in the region of its initial position. With model values of the oscillation frequency of the chain sites and the friction coefficient, which significantly exceed the corresponding values of the parameters of DNA chains, the charge can move along the chain over a sufficiently large distance.

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