

## Проявление элементов блоховских осцилляций полярона в процессе его равномерного движения по цепочке

Коршунова А.Н., Лахно В.Д.

ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Пуццино, Россия

[alya@impb.ru](mailto:alya@impb.ru)

Проведенные исследования показали, что блоховские осцилляции, обычно наблюдаемые в процессе колебательного режима движения полярона по цепочке, наблюдаются и при равномерном движении полярона по цепочке, хотя и в несколько иной форме. В этом случае элементы блоховских осцилляций демонстрируют низкоплотные составляющие полярона. В данной работе показана зависимость характера равномерного движения полярона в цепочке от значений параметров цепочки и от длины цепочки. Графики функций, описывающие движение центра масс частицы в цепочках с большими значениями коэффициента трения и частоты колебаний сайтов цепочки, блоховских осцилляций явно не демонстрируют. В цепочках с небольшими значениями коэффициента трения и частоты колебаний сайтов цепочки хорошо заметны осцилляции на графиках движения центра масс частицы. Причём период этих осцилляций соответствует периоду блоховских осцилляций для заданного значения постоянного электрического поля, но амплитуда колебаний значительно меньше максимальной блоховской амплитуды, наблюдаемой при колебательном движении полярона. Показано также, что если низкоплотные составляющие полярона не помещаются в цепочку заданной длины, то блоховские осцилляции на графиках функций движения центра масс частицы нарушаются и эти графики принимают другую форму.

*Ключевые слова:* ДНК, нанобиоэлектроника, полярон, перенос заряда, модель Холстейна.

### Demonstration of the Elements of Bloch Oscillations of a Polaron during Its Uniform Motion along the Chain

Korshunova A.N., Lakhno V.D.

IMPB RAS – Branch of KIAM RAS

The performed researches showed that Bloch oscillations, usually observed during the oscillatory regime of polaron motion along the chain, are also observed during the uniform motion of the polaron along the chain, although in a slightly different form. In this case, the elements of the Bloch oscillations demonstrate the low-density components of a polaron. In this work, the dependence of the nature of the uniform motion of a polaron in a chain on the values of the chain parameters and on the length of the chain is shown. The graphs of functions describing the motion of the center of mass of a particle in chains with large values of the coefficient of friction and the oscillation frequency of chain sites do not demonstrate Bloch oscillations explicitly. In chains with small values of the friction coefficient and the oscillation frequency of chain sites, there are clearly visible the oscillations on the graphs of the motion of the center of mass of the particle. Moreover, the period of these oscillations corresponds to the period of Bloch oscillations for a given value of a constant electric field, but the oscillation amplitude is much less than the maximum Bloch amplitude observed during the oscillatory motion of a polaron. It is also shown that if the low-density components of a polaron do not fit in a chain of a given length, then the Bloch oscillations on the graphs of the motion functions of the center of mass of the particle are violated and these graphs take a different form.

*Key words:* DNA, nanobioelectronics, polaron, charge transfer, Holstein model.

### 1. Введение

Транспорт заряда в ДНК рассматривается во многих теоретических работах [1–7]. Это связано с перспективой использования полинуклеотидных цепочек в нанобиоэлектронике [8–12].

Возможность равномерного движения заряда в однородной холстейновской цепочке при

небольших значениях напряжённости постоянного электрического поля на очень большие расстояния была показана в работах [13, 14]. При больших значениях напряжённости электрического поля равномерного движения заряда не наблюдается, заряд теряет первоначальную форму (сразу или постепенно) и переходит в колебательный режим движения с блоховскими осцилляциями. При

уменьшении значения напряжённости постоянного электрического поля и переходе от колебательного к равномерному режиму движения заряда блоховские осцилляции полностью не исчезают.

Проведённые ранее исследования показывают, что форма полярона в процессе стационарного движения в постоянном электрическом поле принимает явно выраженную структуру [15]: осциллирующая низкоплотная часть полярона, сохраняющая свое положение в цепочке, участок с почти нулевыми значениями амплитуд вероятностей локализации заряда на  $n$ -ом сайте, собственно полярон, близкий по форме к начальному, идущее перед поляроном предшествующее возбуждение (или предшествующая низкоплотная часть полярона). Осциллирующая часть полярона сохраняет свое положение в цепочке в пределах одной максимальной блоховской амплитуды, около центра начального полярона. С самого начала движения осциллирующая часть полярона совершает колебания, период которых близок к периоду блоховских осцилляций для заданной напряжённости электрического поля.

В процессе равномерного движения полярона по цепочке характеристики блоховских осцилляций, такие, как период блоховских осцилляций и максимальная блоховская амплитуда, демонстрируют низкоплотные составляющие полярона.

В данной работе проведено численное моделирование равномерного движения полярона в однородной полинуклеотидной цепочке в постоянном электрическом поле. Показано влияние низкоплотных составляющих полярона на характер его распределения по цепочке в зависимости от значений параметров цепочки, от начального поляронного состояния и от длины цепочки.

## 2. Математическая модель

Моделирование динамического поведения полярона в однородной незамкнутой полинуклеотидной цепочке, состоящей из  $N$  сайтов, выполнялось в рамках простейшей квантово-классической модели Холстейна [16]. Каждый сайт представляет собой нуклеотидную пару, которая рассматривается как гармонический осциллятор [17]. Цепочка рассматривается однородная, незамкнутая, имеющая два конца.

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,  $\omega$  – частота колебаний  $n$ -го сайта,  $\omega'$  – коэффициент трения,  $u_n$  – смещения сайтов из равновесных положений,  $\eta$  – матричные элементы

перехода по сайтам,  $E$  – напряжённость постоянного электрического поля,  $\kappa$  – константа связи,  $\tilde{t} = t/\tau$ , где  $\tau$  – произвольный масштаб времени, в данной работе в вычислениях используется  $\tau = 10^{-14}$  сек.

Система нелинейных дифференциальных уравнений (1), (2) решается методом Рунге – Кутты четвертого порядка.

## 3. Блоховские осцилляции полярона в процессе его равномерного движения по цепочке в постоянном электрическом поле

Для моделирования равномерного движения полярона в постоянном электрическом поле были выбраны следующие значения безразмерных параметров цепочки:  $\kappa = 4$ ,  $\eta = 2.4$ ,  $\omega = 0.01$ ,  $\omega' = 0.006$ . Начальные значения  $b_n(0)$  были выбраны в виде растянутого обратного гиперболического косинуса:

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

где  $\xi$  – коэффициент растяжения. При  $\xi = 1$  функция вида (3) соответствует стационарному решению уравнений (1), (2) в отсутствие внешнего поля. Для цепочки с параметрами  $\kappa = 4$ ,  $\eta = 2.4$  обратный гиперболический косинус или начальный полярон вида (3) максимально близок к устоявшемуся полярону при  $\xi = 0.95$ . Устоявшимся мы называем полярон, который не изменяет своей формы и не смещается из своего положения в цепочке при отсутствии электрического поля или внешних возбуждений.

На рисунке 1 показаны графики функций  $|b_n(0)|^2$  вида (3) при  $\xi = 0.95$  и  $\xi = 1.5$ . Для моделирования движения полярона в постоянном электрическом поле будем помещать в цепочку начальное поляронное состояние вида (3) при нужных значениях коэффициента растяжения  $\xi$ . Центр полярона располагается на сайте цепочки с номером  $n_0$ . Значение  $n_0$  (центр начального обратного гиперболического косинуса) в (3) выбирается так, чтобы на начальном этапе вычислений полярон находился достаточно далеко от концов цепочки. Поле включается “мгновенно” в начальный момент времени.

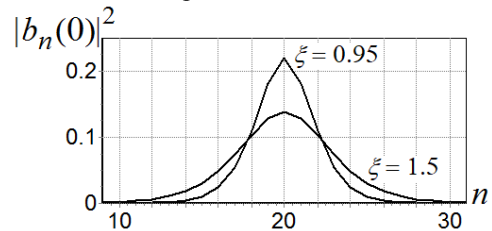


Рис. 1. Графики функции  $|b_n(0)|^2$  для  $\xi = 0.95$  и  $\xi = 1.5$ . Значения параметров цепочки  $\kappa = 4$ ,  $\eta = 2.4$ .

Начальное поляронное состояние вида (3) выбирается растянутым (коэффициент растяжения  $\xi = 1.5$ ) для наглядности представления элементов блоховских осцилляций в процессе равномерного движения полярона по цепочке при небольших значениях частоты колебаний сайтов и коэффициента трения.

При достаточно больших значениях напряжённости электрического поля наблюдается колебательный режим движения заряда с блоховскими осцилляциями. В этом случае в начальный период времени заряд, практически целиком, смещается по сайтам в направлении поля на расстояние одной максимальной блоховской амплитуды. Затем заряд возвращается к начальным положениям, и далее совершает колебательные движения. Центр масс заряда смещается примерно на ту же величину, то есть, в начальный период времени функция  $|b_n(\tilde{t})|^2$  демонстрирует блоховские осцилляции заряда с амплитудой колебаний равной примерно одной максимальной блоховской амплитуде. Характеристики блоховских осцилляций следующие: период блоховских осцилляций  $T_{BL} = 2\pi/E$ . Максимальная блоховская амплитуда  $A_{BL} = 4\eta/E$ .

Далее мы покажем существование элементов блоховских осцилляций и характер распределения полярона по цепочке в процессе его равномерного движения при выбранных значениях частоты колебаний сайтов и коэффициента трения.

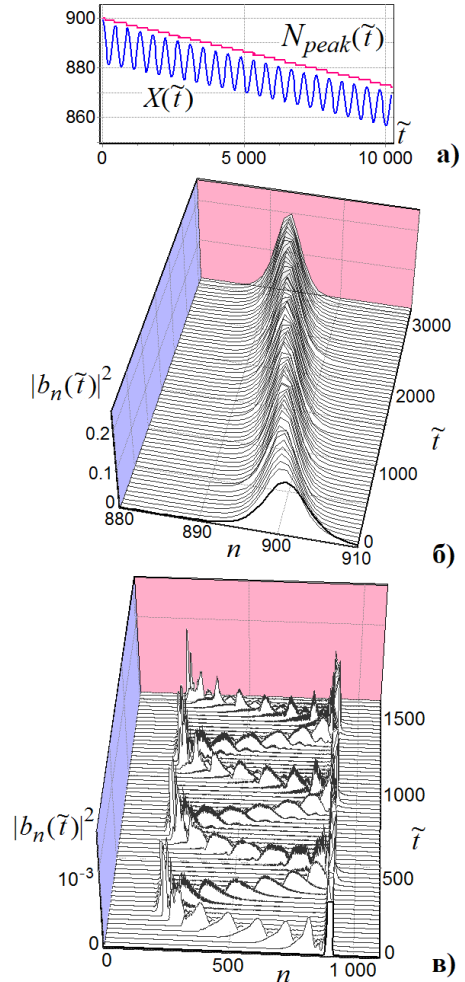
На рисунке 2 показан пример равномерного движения полярона в электрическом поле напряжённостью  $E = 0.014$ .

На рис. 2,а) представлены графики функций  $X(\tilde{t})$ , описывающей поведение центра масс частицы,

$X(\tilde{t}) = \sum_n |b_n(\tilde{t})|^2 n$ , и  $N_{peak}(\tilde{t})$ , которая показывает номер сайта, на котором находится пик полярона. Период осцилляций функции  $X(\tilde{t})$  на рис. 2,а) близок к теоретическому периоду блоховских осцилляций для заданного значения напряжённости электрического поля,  $T_{BL} \approx 449$ . При этом амплитуда осцилляций функции  $X(\tilde{t})$  значительно меньше максимальной блоховской амплитуды для заданного значения напряжённости поля,  $A_{BL} \approx 686$ .

Пик полярона на рис. 2,а) и график функции  $|b_n(\tilde{t})|^2$  на рис. 2,б) демонстрируют равномерное движение полярона в течение показанного времени. За безразмерное время  $\tilde{t} \approx 3000$  полярон постепенно смещается на семь сайтов. На рисунках 2,б) и 2,в) показан один и тот же график функции  $|b_n(\tilde{t})|^2$  в разных масштабах. На график выводятся только те значения функции  $|b_n(\tilde{t})|^2$ , которые меньше величины  $10^{-3}$ . Значения  $|b_n(\tilde{t})|^2 > 10^{-3}$  на рис. 2,в) как бы обрезаны для того, чтобы были видны составляющие функции  $|b_n(\tilde{t})|^2$  имеющие маленькие значения. На рис. 2,в) показана осциллирующая низкоплотная часть полярона, сохраняющая свое положение в цепочке в пределах

одной максимальной блоховской амплитуды,  $A_{BL} \approx 686$ , около центра начального полярона. Эта часть полярона совершает колебания, период которых близок к периоду блоховских осцилляций для заданной напряжённости электрического поля.

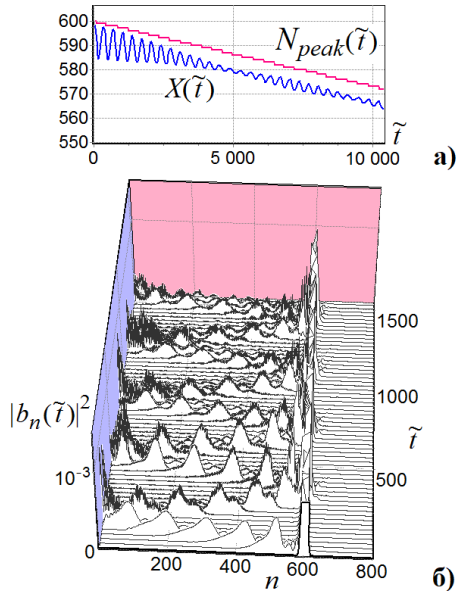


**Рис. 2.** Графики функций  $X(\tilde{t})$ ,  $N_{peak}(\tilde{t})$  и  $|b_n(\tilde{t})|^2$  при  $\kappa = 4$ ,  $\eta = 2.4$ ,  $\omega = 0.01$ ,  $\omega' = 0.006$ . Напряжённость электрического поля  $E = 0.014$ . Длина цепочки  $N = 1101$  сайт,  $n_0 = 900$ . Задано растянутое начальное поляронное состояние вида (3) с коэффициентом растяжения  $\xi = 1.5$ . На рисунках б) и в) показан один и тот же график функции  $|b_n(\tilde{t})|^2$  в разных масштабах (по левой шкале).

Макро часть полярона находится на сайте с номером  $n_0 = 900$ , характерный размер полярона равен примерно семи сайтам, что примерно в сто раз меньше ширины осциллирующей составляющей полярона. Идущее перед собственно поляроном предшествующее низкоплотное возбуждение ещё не видно, так как показано самое начало движения.

Примеры, показанные на рис. 2 и рис. 3 различаются только длиной цепочек. Параметры цепочек во всех трех случаях одинаковые, начальное поляронное состояние вида (3) задано растянутым, коэффициент растяжения  $\xi = 1.5$ ,

центр начального полярона отстоит от края цепочки на 200 сайтов. Аналогично графику  $|b_n(\tilde{t})|^2$  на рис. 2,с) значения  $|b_n(\tilde{t})|^2 > 10^{-3}$  на рисунке рис. 3,б) обрезаны для того, чтобы показать осциллирующую часть полярона.

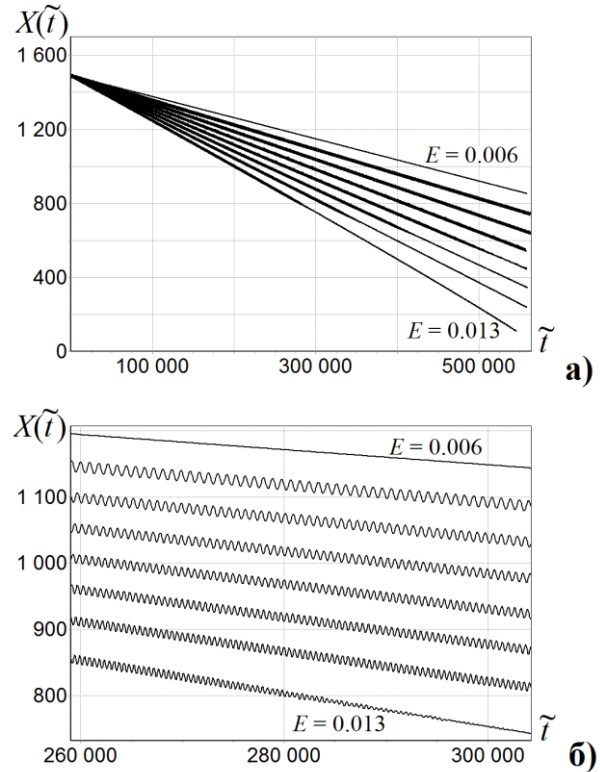


**Рис. 3.** Графики функций  $X(\tilde{t})$ ,  $N_{peak}(\tilde{t})$  и  $|b_n(\tilde{t})|^2$  при  $\kappa = 4$ ,  $\eta = 2.4$ ,  $\omega = 0.01$ ,  $\omega' = 0.006$ ,  $\xi = 1.5$ . Напряжённость электрического поля  $E = 0.014$ . Длина цепочки  $N = 801$  сайт,  $n_0 = 600$ .

Так как максимальная блоховская амплитуда  $A_{BL}$  равна примерно 686 сайтов для  $E = 0.014$ , то осциллирующая часть полярона, ширина которой примерно равна одной максимальной блоховской амплитуде, помещается целиком в цепочке в течение показанного на графиках безразмерного времени, в цепочке длиной  $N = 1101$  сайт, а именно, в примере на рис. 2,с). В более короткой цепочке, в примере на рис. 3), осциллирующая часть полярона целиком в цепочке не помещается и начинает отражаться от конца цепочки. При этом период осцилляций функций  $X(\tilde{t})$  и  $|b_n(\tilde{t})|^2$  становится меньше, а графики этих функций выглядят иначе. Функция  $N_{peak}(\tilde{t})$ , которая показывает положение максимума полярона, указывает на равномерное движение полярона, причем в обоих примерах, на рис. 2 и рис. 3, графики функций  $N_{peak}(\tilde{t})$  практически одинаковые. График  $|b_n(\tilde{t})|^2$  в полном масштабе на рис. 3 не представлен, но он точно такой же, как и на рис. 2,б), только центр начального поляронного состояния находится на сайте  $n_0 = 600$ .

Рисунок 4 демонстрирует равномерное движение полярона при различных значениях напряжённости электрического поля. Представленные графики функций  $X(\tilde{t})$  имеют не только различную толщину линий для различных значений напряжённости электрического поля, но и толщина отдельных графиков меняется со временем, то есть меняется и

исчезает амплитуда колебаний. Это обусловлено влиянием низкоплотных составляющих полярона на характер движения и распределения полярона по цепочке.



**Рис. 4.** Графики функции  $X(\tilde{t})$  при  $\kappa = 4$ ,  $\eta = 2.4$ ,  $\omega = 0.01$ ,  $\omega' = 0.006$ ,  $\xi = 1.5$  для безразмерного времени  $\tilde{t} \approx 560000$ . Напряжённость электрического поля  $E = 0.006, 0.007, \dots, 0.013$ . Длина цепочки  $N = 1701$  сайт,  $n_0 = 1500$ . На нижнем рисунке показан увеличенный участок верхнего рисунка.

Для поля напряжённостью  $E = 0.006$  (верхний график на рис. 4,а и 4,б)) максимальная блоховская амплитуда  $A_{BL} \approx 1600$ , расстояние от начального положения заряда до конца цепочки равно 1500 сайтов. То есть, осциллирующая составляющая полярона не помещается в участок от начального положения до конца цепочки. Поэтому осциллирующая низкоплотная составляющая полярона отражается от конца цепочки в течение половины первого периода и блоховские осцилляции нарушаются. Три графика функции  $X(\tilde{t})$  на рис. 4,а) для  $E = 0.007, 0.008, 0.009$  показывают, что за время вычислений осцилляции еще сохраняются. Для  $E = 0.01, 0.011, 0.012, 0.013$  осцилляции функций  $X(\tilde{t})$  нарушаются в ходе движения. В этих случаях осцилляции нарушает идущее перед макро частью полярона предшествующее возбуждение, которое, дойдя до края цепочки, начинает от края отражаться.

## 5. Выводы

Моделирование равномерного движения полярона по цепочке при различных значениях напряжённости электрического поля показывает, что ширина распределения по сайтам низкоплотных составляющих полярона – осциллирующей и предшествующей частей – примерно равна одной максимальной блоховской амплитуде, соответствующей заданному значению напряжённости электрического поля. Период колебаний осциллирующей составляющей полярона примерно равен периоду блоховских осцилляций для заданного значения напряжённости электрического поля. Показано, что несмотря на то, что значения функции  $|b_n(\tilde{\epsilon})|^2$ , относящиеся к осциллирующей и предшествующей частям полярона очень маленькие, но ширина их распределения по цепочке большая, они оказывают заметное влияние на характер распределения полярона по цепочке в процессе его движения.

## 5. Благодарности

Авторы выражают благодарность МСЦ РАН за предоставленные вычислительные ресурсы.

## 6. Список литературы

1. Davydov A.S. Solitons in Molecular systems. Reidel Publ. Comp., Boston, USA, 1985. 413 p.
2. Chetverikov A.P., Ebeling W., Lakhno V.D., Velarde M.G. Discrete-breather-assisted charge transport along DNA-like molecular wires. *Phys. Rev. E*. 2019. V. 100. 052203. doi: [10.1103/PhysRevE.100.052203](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.052203)
3. Lakhno V.D. *Int. J. Quant. Chem.* Davydov's solitons in homogeneous nucleotide chain. 2010. V. 110. P. 127–137. doi: [10.1002/qua.22264](https://doi.org/10.1002/qua.22264)
4. Buarque A.R.C., Lyra M.L., Dias W.S. Bloch-like superoscillations and unidirectional motion of phase-driven quantum walkers. *Physical Review A*. 2021. V. 103. doi: [10.1103/PhysRevA.103.012222](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.103.012222)
5. Yakushevich L.V., Balashova V.N., Zakiryaynov F.K. On the DNA Kink Motion Under the Action of Constant Torque. *Math. Biol. Bioinf.* 2016. V. 11. No. 1. P. 81–90. doi: [10.17537/2016.11.81](https://doi.org/10.17537/2016.11.81)
6. Starikov E.B., Lewis J.P., Sankey O.F. Base sequence effects on charge carrier generation in DNA: a theoretical study. *International Journal of Modern Physics B*. 2005. V. 19. No. 29. P. 4331–4357. doi: [10.1142/S0217979205032802](https://doi.org/10.1142/S0217979205032802)
7. Fialko N.S., Lakhno V.D., Dynamics of Large Radius Polaron in a Model Polynucleotide Chain with Random Perturbations. *Math. Biol. Bioinf.* 2019. V. 14. No. 2. P. 406–419, doi: [10.17537/2019.14.406](https://doi.org/10.17537/2019.14.406)
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. *Nanobioelectronics – for Electronics, Biology and Medicine*. Eds. Offenhausser A. Rinald R. N. Y.: Springer, 2009.
10. Lakhno V.D. DNA nanobioelectronics. *Int. Quantum. Chem.* 2008. V. 108. P. 1970–1981. doi: [10.1002/qua.21717](https://doi.org/10.1002/qua.21717)
11. 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)
12. Chepeliaskii A., Klinov D., Kasumov A. et. al. Conduction of DNA molecules attached to a disconnected array of metallic Ga nanoparticles. *New J. Phys.* 2011. V. 13. P. 063046. doi: [10.1088/1367-2630/13/6/063046](https://doi.org/10.1088/1367-2630/13/6/063046)
13. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Electron motion in a Holstein molecular chain in an electric field. *Euro. Phys. J. B*. 2011. V. 79. P. 147–151. doi: [10.1140/epjb/e2010-10565-2](https://doi.org/10.1140/epjb/e2010-10565-2)
14. 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)
15. Коршунова А.Н., Лакно В.Д. Блоховские осцилляции холстейновского полярона в процессе его равномерного движения по цепочке в постоянном электрическом поле. *Препринты ИПМ им.М.В.Келдыша*. 2019. № 85. 30 с. doi: [10.20948/prepr-2019-85](https://doi.org/10.20948/prepr-2019-85)
16. 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)
17. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Formation of stationary electronic states in finite homogeneous molecular chains. *Math. Biol. Bioinf.* 2010. V. 5. P. 1–29. doi: [10.17537/2010.5.1](https://doi.org/10.17537/2010.5.1)