



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

Коршунова А.Н., Лахно В.Д.

Быстрое формирование
движущегося поляронного
состояния в однородной
молекулярной
полинуклеотидной цепочке
конечной длины

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Коршунова А.Н., Лахно В.Д. Быстрое формирование движущегося поляронного состояния в однородной молекулярной полинуклеотидной цепочке конечной длины // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 231. 22 с. doi:[10.20948/prepr-2018-231](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-231)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-231>

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

А.Н. Коршунова, В.Д. Лахно

**Быстрое формирование движущегося
поляронного состояния в однородной
молекулярной полинуклеотидной цепочке
конечной длины**

Москва — 2018

А.Н. Коршунова, В.Д. Лахно

Быстрое формирование движущегося поляронного состояния в однородной молекулярной полинуклеотидной цепочке конечной длины

На основе нелинейной модели Пейрарда-Бишопа-Доксуа-Холстейна проведены численные эксперименты, демонстрирующие возможность переноса заряда в однородных незамкнутых G/C цепочках ДНК при отсутствии электрического поля в цепочке. Движение заряда в цепочке обусловлено выбором начальных условий, которые обеспечивают быстрое формирование поляронного состояния и, как следствие, перемещение заряда по цепочке. Показано, что в зависимости от параметров цепочки и от параметров выбранных начальных условий заряд может переноситься на большие расстояния.

Ключевые слова: нанобиоэлектроника, молекулярные провода, молекулярные цепочки, поляроны, ДНК, перенос заряда, модель Пейрарда-Бишопа-Доксуа-Холстейна

A.N. Korshunova, V.D. Lakhno

Rapid formation of a moving polaron state in a homogeneous molecular polynucleotide chain of finite length

The numerical experiments which demonstrate the possibility of charge transfer in a homogeneous G/C DNA chain in the absence of an electric field have been carried out. As a model, which describes the dynamics of a DNA molecule, there was considered the nonlinear Peyrard-Bishop-Dauxois-Holstein model. The motion of the charge in the chain is due to the choice of the initial conditions, which ensure the rapid formation of the polaron state and, as a consequence, charge transfer along the chain. It is shown that, depending on the parameters of the chain and on the parameters of the selected initial conditions, the charge can be transferred along the chain over long distances.

Key words: nanobioelectronics, nanowire, molecular chain, polaron, DNA, charge transfer, Peyrard-Bishop-Dauxois-Holstein model

Авторы выражают благодарность МСЦ РАН за предоставленные вычислительные ресурсы.

1. Введение

Актуальность изучения движения зарядов в одномерных молекулярных цепочках связана с возможностью использования таких цепочек в качестве нанопроводов в нанобиоэлектронных устройствах [1] – [5]. Исследованию транспорта заряда в ДНК посвящено большое количество теоретических работ [6] – [13]. Перенос заряда рассматривался как в однородных, так и в регулярных цепочках ДНК [14, 15], в постоянном и переменном электрических полях [16]–[20], при отсутствии электрического поля за счёт импульсного силового воздействия [21, 22]. Считается, что основным носителем тока в однородных синтетических полинуклеотидных последовательностях является полярон [23, 25, 24, 26].

В наших предыдущих работах [27, 28] мы исследовали процесс переноса полярона в однородной полинуклеотидной цепочке в рамках модели Пейрарда-Бишопа-Холстейна (ПБХ). В этой модели стэкинг-взаимодействие моделировалось гармоническим потенциалом. Как было показано в работе [29], модель Пейрарда-Бишопа не очень точно воспроизводит термодинамические характеристики молекулы и требует учёта ангармонизма стэкинг-взаимодействия. В данной работе для моделирования переноса заряда в однородных *PolyG/PolyC* цепочках мы используем более точную модель Пейрарда-Бишопа-Доксуа [29], в которой учтён ангармонизм стэкинг-взаимодействия.

В данной работе мы исследуем возможности простым способом быстро сформировать в цепочке поляронное состояние, переходящее в полярон, который будет двигаться по цепочке на максимально большое расстояние.

В работе [27] нами было показано, что полярон, помещённый в начальный момент времени не в центр цепочки, приобретает способность двигаться при отсутствии электрического поля и дополнительных возбуждений в цепочке. В статье [28] был рассмотрен поляронный перенос заряда в результате взаимодействия полярона с внешними нелинейными возбуждениями сайтов в начальный момент времени. В этих работах моделирование движения полярона выполнялось на основе модели Пейрарда-Бишопа-Холстейна (ПБХ). Полученные в указанных статьях результаты справедливы и для модели Пейрарда-Бишопа-Доксуа-Холстейна (ПБДХ) при используемых нами параметрах цепочек, поэтому мы будем их использовать для продолжения исследований и в модели ПБДХ.

В данной работе рассматривается простой способ быстрого формирования поляронного состояния в цепочке за счёт смещений из положений равновесия определённого числа соседних сайтов (или частиц) при локализации волновой функции электрона в области смещённых сайтов. Такое возбуждение вносится в цепочку в начальный момент времени. Показано, что для быстрого формирования поляронного состояния, задаваемые начальные условия должны соответствовать параметрам полярона, который образуется в цепочке при выбранных параметрах.

Такие нелинейные возбуждения сайтов при отсутствии заряда в цепочке,

не перемещаются по цепочке, а лишь растекаются по цепочке и затухают со временем, поскольку используется цепочка с диссипацией [28]. Для формирования поляронного состояния использовались ненулевые значения только смещений частиц, ненулевые значения скоростей сайтов цепочки в начальный момент времени использовались для стимуляции движения заряда.

2. Математическая модель

Исследование поляронного переноса заряда в однородной незамкнутой G/C цепочке ДНК выполнялось в рамках квантово–классической модели Пейрарда-Бишопа-Доксуа-Холстейна [29]–[34]. Цепочка рассматривается однородная, незамкнутая, то есть цепочка имеет два конца, это существенно для исследования движения поляронных состояний в цепочке в отсутствие электрического поля.

Динамика квантовой частицы в классической цепочке описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений, которая в безразмерных переменных имеет вид [22]:

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

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

$$f(q_{n-1,n,n+1}) = (q_{n-1} - q_n)[1 + 0.5\kappa(q_{n-1} - q_n)]e^{-\kappa(q_{n-1}+q_n)} + (q_{n+1} - q_n)[1 + 0.5\kappa(q_{n+1} - q_n)]e^{-\kappa(q_{n+1}+q_n)}, \quad (3)$$

где c_n – амплитуды вероятности локализации заряда на n -ом сайте, $\sum_n |c_n|^2 = 1$. τ_e – отношение характерных времён эволюции волновой функции электрона и динамики возмущений в решётке, χ_{el} и χ_h – безразмерные параметры связи электрона и решётки, q_n – нормированное смещение, $\dot{q}_n = dq_n/d\tilde{t}$, ω_{bond} – нормированная частота колебаний сайтов в решётке, $\tilde{t} = \omega_M t$ – безразмерное время, ω_M – частота линейных колебаний в изолированном сайте, Γ – коэффициент трения, $\Gamma = \omega'/\omega_M$, $\omega' = \gamma/M = 6 \cdot 10^{11} \text{сек}^{-1}$ (см.[13]), соответственно, для параметров ДНК $\Gamma = 0.084$, см.[21]. Параметры ρ и κ и функция f характеризуют нелинейную поправку в функции связи нуклеотидных пар.

Энергия квантовой частицы в безразмерных переменных имеет вид (см.[21, 22]):

$$\tilde{E} = \frac{2\tau_e\chi_h}{\chi_{el}} \sum_n (c_n^* c_{n+1} + c_{n+1}^* c_n) + 2\chi_h \sum_n q_n |c_n|^2 + \sum_n \dot{q}_n^2 + \omega_{bond}^2 \sum_n (q_n - q_{n-1})^2 (1 + \rho e^{-\kappa(q_n+q_{n+1})}) + \sum_n (e^{-q_n} - 1)^2. \quad (4)$$

В размерном виде энергия полярона $E = \tilde{E} \cdot D$, где D – энергия связи (или глубина потенциальной ямы) в потенциале Морзе, см.[21].

Введём обозначение: $v_n(\tilde{t}) = \dot{q}_n(\tilde{t})$.

(1) – дискретные уравнения Шрёдингера для электрона, (2) – уравнения движения нуклеотидных пар.

Система нелинейных дифференциальных уравнений (1), (2) решается методами (a) – типа Рунге-Кутты 4-го порядка и (b) – явного 4-шагового метода Адамса-Бэшофота на этапе предсказания и расчетом поправки 3-шаговым методом Адамса-Мултона. Расчёты выполнялись с использованием вычислительных средств МСЦ РАН.

3. Формирование поляронного состояния в цепочке

Напомним, что представляет собой полярон в полинуклеотидной цепочке. Например, одно из определений полярона следующее: полярон – квазичастица, состоящая из электрона и сопровождающей его деформации решётки. Находящийся в цепочке полярон формирует смещения сайтов в форме, близкой к обратному гиперболическому косинусу (см. [27]).

Значения параметров, используемые далее в численном моделировании, выбраны в соответствии с параметрами модели Пейрарда-Бишопа-Холстейна (ПБХ) и модели Пейрарда-Бишопа-Доксуа-Холстейна (ПБДХ) в работах [21, 22]. Полинуклеотидной цепочке *PolyG/PolyC* соответствуют следующие значения параметров: $\tau_e = 18$, $\chi_{el} = 8.5$, $\chi_h = 0.5$, $\omega_{bond} = 0.2$, $\Gamma = 0.084$, $\rho = 0.5$ и $\kappa = 0.08$. Таким параметрам цепочки в ПБДХ модели соответствует очень широкий полярон, располагающийся на большом количестве сайтов. Характерный размер такого полярона $\lim_{\tilde{t} \rightarrow \infty} d(\tilde{t}) \approx 52$, где

$$d(\tilde{t}) = \sum |c_n(\tilde{t})|^2 / \sum |c_n(\tilde{t})|^4 = 1 / \sum |c_n(\tilde{t})|^4. \quad (5)$$

В выражении (5) характерный размер заряда показан в безразмерном виде. В размерном виде характерный размер заряда равен $d(\tilde{t}) \cdot a_0$, где $a_0 = 3.5 \text{ \AA}$ – расстояние между соседними уотсон–криковскими парами. На рис.1 показаны графики функций распределения электронной вероятности $|c_n|^2$ и графики безразмерных нормированных смещений q_n устоявшихся поляронов для различных значений параметров χ_{el} и χ_h . Соответствующий характерный размер полярона $d(\infty)$ вида (5) для $\chi_{el} = 42.5$ примерно равен 4.0, для $\chi_{el} = 17$. – $d(\infty) \approx 15.0$. Характерные размеры этих поляронов при нулевых значениях параметров ρ и κ в функции (3) практически не отличаются от размеров поляронов при используемых в этой работе значениях: $\rho = 0.5$ и $\kappa = 0.08$. Заметим, что при большом увеличении значений параметров ρ и κ в функции поправки Доксуа (3), характерный размер полярона может увеличиваться довольно значительно.

В работах [27, 28] рассматривалось движение полярона в цепочке, причём в начальный момент времени в цепочку помещался как полярон, соответствующий заданным параметрам цепочки, так и поляронное состояние уже или шире нормального полярона (или устоявшегося полярона). Далее мы рассмотрим образование в цепочке заряженной квазичастицы, или, другими словами,

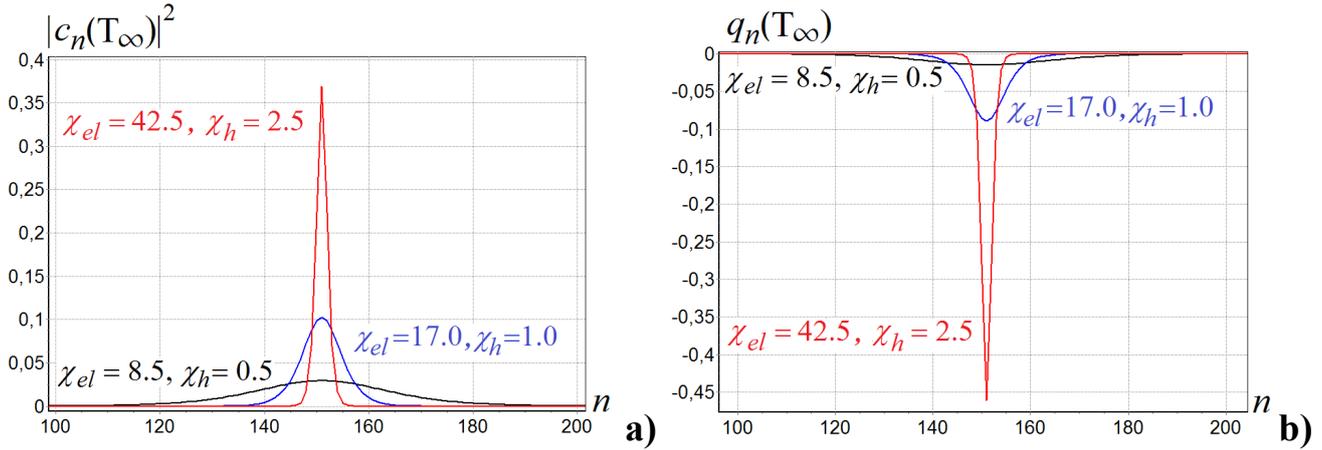


Рис. 1. Графики функции $|c_n|^2$ и q_n для устоявшихся поляронов в центре цепочки длиной $N=301$ сайт для различных значений параметров χ_{el} и χ_h .

образование связанного состояния электрона и деформации решётки, за счёт правильно подобранных смещений сайтов и соответствующего им количества сайтов, на которых локализуется полярон.

При больших значениях коэффициента трения, например при $\Gamma > 0.1$, в конечной цепочке полярон образуется быстрее, чем при маленьком трении, причём из любых начальных условий. Так как нас интересует возможность быстрого формирования полярона в цепочке из заданных начальных условий, то для моделирования возьмём маленькое значение коэффициента трения $\Gamma = 0.001$. То есть такое значение значения коэффициента трения, при котором произвольное начальное распределение заряда в цепочке медленно (или плохо) собирается в полярон. Таким образом мы выберем такие начальные условия, при которых полярон сформируется действительно быстро.

Рассмотрим формирование поляронного состояния в цепочке с безразмерными параметрами связи электрона и решётки $\chi_{el} = 42.5$ и $\chi_h = 2.5$. Характерный размер полярона в такой цепочке примерно равен 4.0. Максимальное безразмерное смещение сайтов в центре полярона равно примерно -0.46 . Безразмерная полная энергия полярона в цепочке с указанными значениями параметров χ_{el} и χ_h вида (4) равна $\tilde{E} \approx -4.85$.

На рисунке 2 представлены примеры распределения заряда в цепочке из различных начальных условий. Заряд в начальный момент времени локализован на нескольких центральных сайтах. Возбуждения решётки формируются за счёт смещения сайтов из положений равновесия в начальный момент времени. Скорости сайтов в начальный момент времени нулевые. Центр цепочки находится на сайте с номером $n = 51$, длина цепочки 101 сайт. Были выбраны различные значения для безразмерных величин начальных смещений сайтов, во всех случаях начальное смещение сайтов выбрано в виде ступеньки. Красным цветом показаны графики функций $|c_n(0)|^2$, то есть в начальный момент времени.

На рисунке 2,а задано отрицательное смещение пяти центральных сайтов:

$q_{49}(0) = \dots = q_{53}(0) = -0.4$. Заряд в начальный момент времени равномерно распределён на этих же сайтах: $c_{49}(0) = \dots = c_{53}(0) = 1/\sqrt{5}$.

На рисунках 2,б и 2,в заряд равномерно распределён на одиннадцати центральных сайтах: $c_{46}(0) = \dots = c_{56}(0) = 1/\sqrt{11}$ в начальный момент времени. Для тех же одиннадцати сайтов задано начальное отрицательное смещение. На рисунке 2,б величина начального смещения каждого из одиннадцати сайтов взята равной $q_n(0) = -0.2$, на рисунке 2,в начальные смещения сайтов заданы также одинаковыми, но равными $q_n(0) = -0.5$.

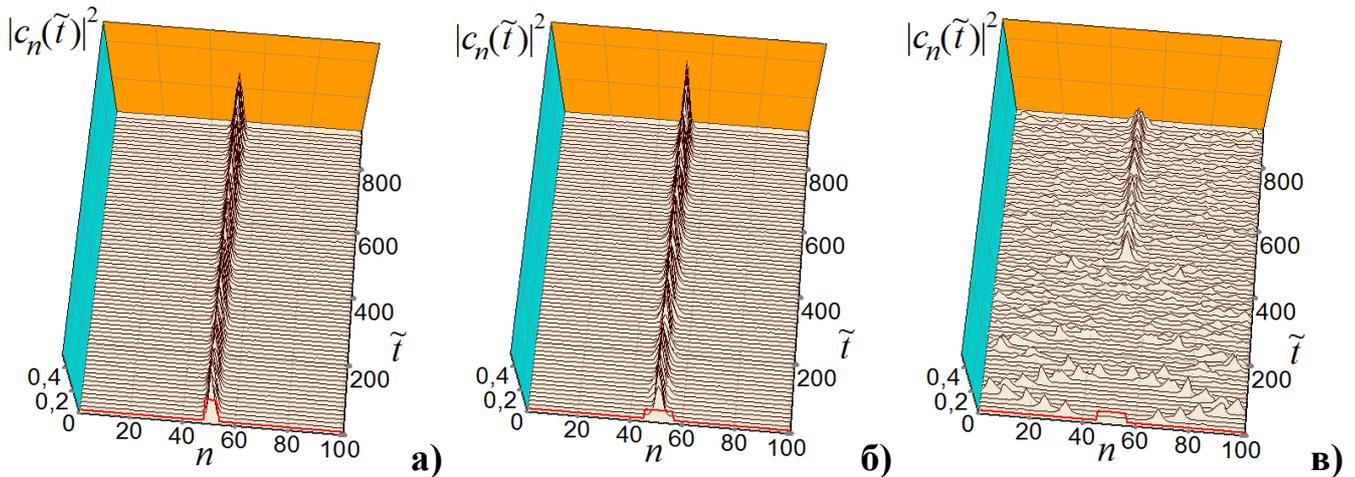


Рис. 2. Графики функций $|c_n(\tilde{t})|^2$ при различных начальных возбуждениях в цепочке. Начальные возбуждения обусловлены смещением сайтов из положений равновесия и расположены по центру цепочки. Длина цепочки 101 сайт.

Графики функций $|c_n(\tilde{t})|^2$, представленные на рисунках 2,а и 2,б, наглядно демонстрируют быстрое образование устойчивого связанного состояния электрона и деформации решётки из заданных начальных условий. Образованное связанное состояние электрона и деформации решётки близко по форме и по энергии к полярону в цепочке и довольно быстро преобразуется в полярон. То есть из заданных начальных условий мы получаем очень быстро устойчивое поляронное состояние, переходящее в полярон. В примере на рисунке 2,а полярон образуется быстрее, чем в примере на рис. 2,б. Это следует из того, что форма начального возбуждения в первом случае ближе к форме полярона в цепочке. А именно: характерный размер полярона в цепочке с этими параметрами примерно равен 4.0, характерный размер заряда в примере на рисунке 2,а в начальный момент времени равен 5.0, в примере на рисунке 2,б – равен 11.0. Смещение пяти сайтов на величину $q_n(0) = -0.4$ по форме близко к смещению сайтов, которые формирует полярон в цепочке. Смещение одиннадцати сайтов на величину $q_n(0) = -0.2$ меньше похоже на поляронное смещение. Но в этих двух случаях полярон формируется быстро, так как полная энергия начального состояния цепочки и заряда близка к полной безразмерной энергии полярона $\tilde{E}_{pol} \approx -4.85$: в примере на рис. 2,а – $\tilde{E}(0) \approx -4.15$, в примере на рис. 2,б – $\tilde{E}(0) \approx -4.3$. Несмотря на то что полная безразмерная

энергия начального состояния цепочки и заряда в примере на рис. 2,б ближе к энергии полярона, чем в примере на рис. 2,а, полярон образуется медленнее, так как форма начальной деформации решётки и соответствующего распределения электрона ближе к форме полярона в примере на рис. 2,а.

Пример на рисунке 2,в отличается от примера на рисунке 2,б только тем, что значения начальных смещений сайтов взяты больше, чем в предыдущем случае, $q_n(0) = -0.5$, а не $q_n(0) = -0.2$. Полная безразмерная энергия начального состояния цепочки и заряда в примере на рис. 2,в значительно отличается от полной безразмерной энергии полярона и примерно равна $\tilde{E}(0) \approx -1.67$. В этом случае мы видим, что начальный заряд сразу распадается и полярон образуется не скоро.

Из представленных примеров следует, что для того, чтобы в цепочке быстро образовался полярон, необходимо, чтобы энергия и форма начального состояния цепочки и соответствующего начального распределения заряда были близки к энергии и форме полярона в цепочке при заданных параметрах.

4. Движение заряда, расположенного в центре цепочки, обусловленное наличием локализованных возбуждений

В работе [28] было рассмотрено движение полярона в цепочке в результате взаимодействия полярона с нелинейными возбуждениями сайтов в начальный момент времени. В данном случае в начальный момент времени мы помещаем в цепочку не полярон, а близкий к нему по форме заряд в виде ступеньки: заряд локализован на нескольких сайтах с одинаковыми начальными отрицательными смещениями. Во взаимодействии с локализованными возбуждениями полярона и заряда в виде ступеньки есть много общего, но есть и различия. В этом разделе мы рассмотрим случай, когда заряд расположен по центру цепочки и без внешнего воздействия он достаточно быстро собирается в полярон.

Как для полярона, так и для ступенчатого заряда, расположенного по центру цепочки, будем использовать ненулевые значения смещений частиц и/или их скоростей в начальный момент времени для стимуляции движения заряда по цепочке. При использовании ненулевых начальных смещений сайтов цепочки при наличии заряда в цепочке необходимо учитывать положение соответствующих заряду смещений сайтов в цепочке и с осторожностью их изменять. Если смещения этих сайтов будут несимметричны относительно центра цепочки и не разрушат заряд, то заряд будет двигаться по цепочке точно так же, как находящийся не в центре цепочки полярон. Начальные смещения сайтов для формирования полярона в цепочке можно задавать самые разнообразные: одинаковые смещения, ненулевые чередующиеся с нулевыми или другими значениями. Важно, чтобы форма начального заряда и его энергия были достаточно близки к форме и энергии

полярона.

Если оказывать внешнее воздействие на сайт, на котором находится центр заряда, то поведение заряда аналогично поведению полярона. Большое воздействие разбивает заряд, и функции вероятностей и смещений сайтов цепочки, обусловленные наличием заряда, сразу разделяются на две части – и полярон будет образовываться недостаточно быстро. Время формирования полярона из начального заряда зависит в основном от величины воздействия и от значения коэффициента трения (см. [28]). При маленьком воздействии на центральный сайт заряд может быстро преобразоваться в полярон.

В этом разделе для численного моделирования движения заряда была выбрана цепочка с безразмерными параметрами связи электрона и решётки $\chi_{el} = 42.5$ и $\chi_h = 2.5$. Напомним, что характерный размер полярона в такой цепочке примерно равен 4.0, максимальное безразмерное смещение сайтов в центре полярона равно примерно -0.46 .

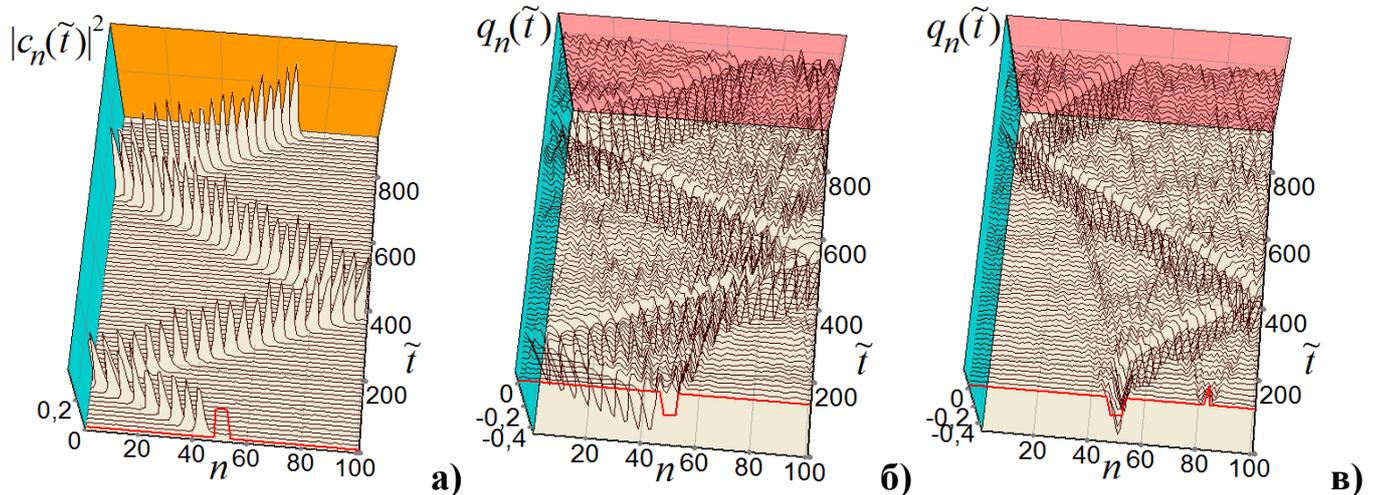


Рис. 3. Графики функций $|c_n(\tilde{t})|^2$ и $q_n(\tilde{t})$. В начальный момент времени заряд распределён равномерно на пяти смещённых сайтах, расположенных по центру цепочки на сайте с номером $n = 51$, длина цепочки 101 сайт. На графиках а) и б) в начальный момент времени задана ненулевой скоростью соседнего с центром цепочки сайта $v_{52}(0) = 0.2$. На графике в) в начальный момент времени задано ненулевое смещение сайта с номером 82 – $q_{82}(0) = 0.2$.

В примерах на рисунке 3 в начальный момент времени заряд локализован на пяти центральных сайтах: $c_{49}(0) = \dots = c_{53}(0) = 1/\sqrt{5}$ и задано отрицательное смещение этих сайтов: $q_{49}(0) = \dots = q_{53}(0) = -0.2$. На рисунках 3,а и 3,б показаны графики функций $|c_n(\tilde{t})|^2$ и $q_n(\tilde{t})$ одного и того же вычислительного эксперимента: стимуляция движения заряда выполнена заданием ненулевой начальной скорости соседнего с центром цепочки сайта $v_{52}(0) = 0.2$. Представленные графики наглядно демонстрируют, как функция распределения заряда и функция смещений сайтов быстро принимают форму, очень близкую к соответствующим функциям полярона. В показанном примере заряд движется в

сторону от сайта, на котором была задана ненулевая начальная скорость. Как и при движении полярона (см. [28]), вызванного ненулевыми начальными значениями смещений сайтов или их скоростей, направление движения заряда из примера на рисунках 3,а и 3,б зависит от взаимного расположения центра заряда и сайта с ненулевой начальной скоростью, от знака и значения скорости сайта. Например, если в примере на рисунках 3,а и 3,б задать отрицательное значение начальной скорости сайта $v_{52}(0) = -0.2$, то заряд будет двигаться в противоположную сторону. Но это верно для указанных значений и условий. При других параметрах, при другой начальной форме заряда, при других значениях ненулевой начальной скорости сайта направление движения заряда может изменяться как угодно.

Есть существенное отличие движения заряда из начальной “ступеньки” и из начального устоявшегося полярона. В работе [28] мы показали, что устоявшийся полярон не сдвинется из своего начального положения в центре цепочки, если локализованное начальное возбуждение находится достаточно далеко от полярона, даже при маленьком трении. Пример на рисунке 3,в показывает движение заряда из центра цепочки вследствие начального смещения достаточно далеко расположенного сайта с номером 82,а именно, $q_{82}(0) = 0.2$. Полярон при таких условиях не сдвинется из своего начального положения (см. [28]), а внесённое начальное возбуждение решётки в виде начального ненулевого смещения сайта с номером 82 постепенно затухнет, так как в решётке есть небольшое трение $\Gamma = 0.001$.

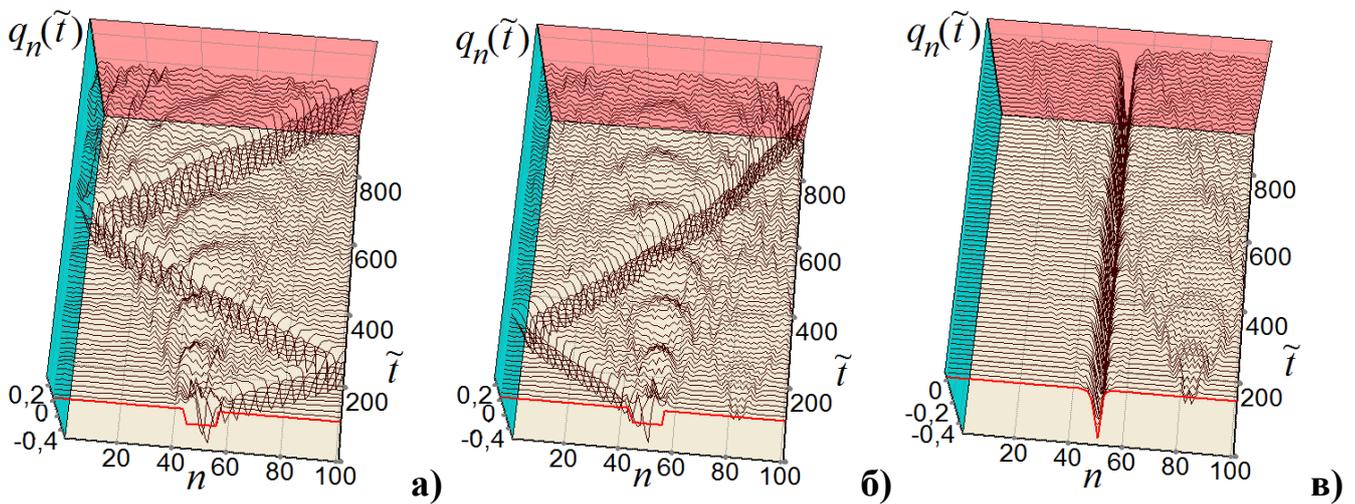


Рис. 4. Графики функций $q_n(\tilde{t})$ при начальном возбуждении в цепочке, заданном ненулевой начальной скоростью сайта. На графике а) в начальный момент задана ненулевой скоростью соседнего с центром цепочки сайта $v_{52}(0) = 0.2$. На графиках б) и в) в начальный момент времени задана ненулевой скоростью сайта с номером 82 – $v_{82}(0) = 0.2$.

В примерах на рисунке 4 стимуляция движения заряда выполнена использованием ненулевой начальной скорости одного сайта цепочки. Величина этой начальной скорости во всех трёх случаях одинаковая и равна 0.2. На всех

трёх графиках на рис. 4 показаны графики функций $q_n(\tilde{t})$, так как они наглядно демонстрируют не только движение собственно заряда, но и ясно показывают поведение в цепочке начального возбуждения, вызванного ненулевой начальной скоростью одного сайта.

На рисунках 4,а и 4,б в начальный момент времени заряд локализован равномерно на одиннадцати центральных сайтах: $c_{46}(0) = \dots = c_{56}(0) = 1/\sqrt{11}$ и задано одинаковое отрицательное смещение каждого из этих сайтов: $q_{46}(0) = \dots = q_{56}(0) = -0.2$. То есть, на этих двух рисунках начальное распределение заряда и соответствующие заряду смещения выбраны одинаковыми и расположены по центру цепочки. Если не вносить в цепочку никаких дополнительных возбуждений, то такое начальное состояние заряда и решётки очень быстро преобразуется в состояние, похожее на полярон, и со временем преобразуется в устоявшийся полярон, для которого $\sum_n \dot{q}_n^2(\tilde{t}) < \varepsilon$ для любого $\tilde{t} > T_{steady}$, ε – величина, близкая к нулю (см. [27]).

В примере на рис. 4,а задана ненулевая начальная скорость соседнего с центром цепочки сайта: $v_{52}(0) = 0.2$. На графиках рис. 4,б и рис. 4,в задана ненулевая начальная скорость сайта с номером 82: $v_{82}(0) = 0.2$. Примеры на рис. 4,а и 4,б отличаются только положением сайта с ненулевой начальной скоростью. Представленные графики показывают, что заряд сразу приходит в движение в обоих случаях и в процессе движения преобразуется в полярон. В работе [28] показано, что чем дальше от центра полярона находится локализованное возбуждение, тем меньшее воздействие оно оказывает на скорость движения полярона. Можно сказать, что заряд движется быстрее, если начальное возбуждение в виде сайта с ненулевой начальной скоростью находится ближе к центру заряда. Но это верно только в тех случаях, когда возбуждения вносятся на одном из нескольких сайтов около центра заряда. Как при использовании полярона в начальный момент времени, так и в показанном примере направление и скорость движения заряда зависят от множества параметров, в частности: от взаимного расположения центра заряда и внесённого локализованного возбуждения, от формы заряда и формы возбуждения, от величины используемого возбуждения.

Пример на рис. 4,в отличается от примера на рис. 4,б только тем, что в начальный момент времени в центре цепочки на рис. 4,в находится полярон. Представленный график наглядно показывает, что полярон не сдвигается из своего начального положения, практически не реагирует на внесённое локализованное возбуждение. Также на графике хорошо видно, как начальное возбуждение на сайте с номером 82 ($v_{82}(0) = 0.2$) растекается по цепочке, отражается от правого конца цепочки и постепенно затухает. Заметим, что на рис. 4,б одновременно с движением заряда в цепочке тоже хорошо видны изменения в смещениях сайтов вследствие ненулевой начальной скорости сайта с номером 82. Проведённые вычисления показывают, что, в отличие от полярона, использованный нами заряд в виде “ступеньки”, реагирует на локализованное возбуждение, находящееся достаточно далеко от центра заряда.

5. Движение заряда, обусловленное положением заряда в цепочке, при отсутствии локализованных возбуждений

В предыдущем разделе мы рассмотрели движение заряда по цепочке вследствие внесённого локализованного возбуждения. Покажем, что заряд может двигаться по цепочке при отсутствии внешних возбуждений сайтов и при отсутствии электрического поля.

Ранее в работе [27] нами было показано, что полярон, помещённый в начальный момент времени не в центр цепочки, приобретает способность двигаться при отсутствии электрического поля и дополнительных возбуждений в цепочке. Показано, что начальное поляронное состояние, взятое шире или уже (и выше) устоявшегося полярона, обладает большими возможностями к движению по сравнению с устоявшимся поляроном. Кроме того, более узкое поляронное состояние можно расположить ближе к краю цепочки, не нарушая его формы и сохраняя условие нормировки $\sum_n |c_n|^2 = 1$. Показано также, что максимально близкое расположение начального поляронного состояния к краю цепочки позволяет придать ему большую скорость движения (см. [27]).

На рисунке 5,а показан пример движения заряда из начального поляронного состояния, взятого уже и выше устоявшегося полярона, для заданных параметров цепочки. Напомним, что рассматривается движение заряда в цепочке со следующими значениями параметров: $\tau_e = 18$, $\chi_{el} = 42.5$, $\chi_h = 2.5$, $\Gamma = 0.001$. Характерный размер устоявшегося полярона для такой цепочки $d(\infty) \approx 4.0$. Начальные значения взяты в виде обратного гиперболического косинуса:

$$|c_n(0)| = \frac{\sqrt{2}}{4} \sqrt{\frac{\chi_{el} \cdot \chi_h}{\tau_e \xi}} \operatorname{ch}^{-1} \left(\frac{(\chi_{el} \cdot \chi_h)(n - n_0)}{4\tau_e \xi} \right), \quad (6)$$

$$q_n(0) = -|c_n(0)|^2 \cdot \chi_h / \xi, \quad \dot{q}_n(0) = 0,$$

где ξ – коэффициент растяжения, с помощью которого мы можем подобрать начальный полярон вида (6) максимально близким к устоявшемуся. При таких параметрах цепочки максимально близким к устоявшемуся полярону является начальный полярон вида (6) при значении коэффициента $\xi = 2$. В примере на рисунке 5,а начальные значения взяты в виде обратного гиперболического косинуса вида (6) с коэффициентом растяжения $\xi = 1.5$, характерный размер такого начального поляронного состояния $d(\infty) \approx 3.0$. Центр начального поляронного состояния находится на сайте с номером 5, $n_0 = 5$.

Представленный на рис. 5,а график функции $|c_n(\tilde{t})|^2$ показывает, что выбранное начальное поляронное состояние вида (6) с коэффициентом растяжения $\xi = 1.5$, сразу начинает двигаться и очень быстро принимает форму устоявшегося полярона с характерным размером $d(\infty) \approx 4.0$. В работе [27] показано, что максимальную скорость движения заряда можно получить, если выбранное вытянутое начальное

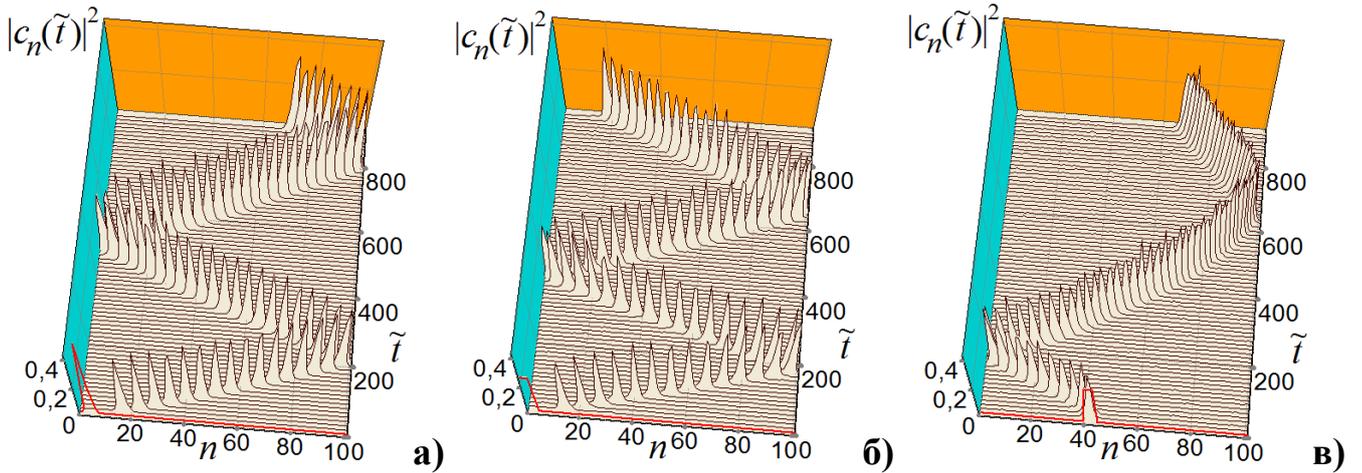


Рис. 5. Графики функций $|c_n(\tilde{t})|^2$ при различных начальных возбуждениях в цепочке. На графике а) в начальный момент времени в цепочке находится поляронное состояние вида (6) с коэффициентом растяжения $\xi = 1.5$. На графиках б) и в) в начальный момент времени заряд распределён равномерно на пяти смещённых сайтах. Длина цепочки 101 сайт.

поляронное состояние расположить ближе к концу цепочки. Мы поместили центр начального заряда на сайт с номером 5, ближе подвинуть нельзя, так как нарушится условие нормировки.

В примерах, показанных на рис. 5,б и рис. 5,в, в начальный момент времени смещено по пять сайтов. На рис. 5,б смещены сайты, расположенные на конце цепочки, $q_1(0) = \dots = q_5(0) = -0.4$, заряд в начальный момент времени равномерно распределён на этих же сайтах: $c_1(0) = \dots = c_5(0) = 1/\sqrt{5}$. На рис. 5,в смещены сайты с номерами 40 – 44, $q_{40}(0) = \dots = q_{44}(0) = -0.4$, соответственно $c_{40}(0) = \dots = c_{44}(0) = 1/\sqrt{5}$. В примере на рис. 5,б заряд движется быстрее, чем из поляронного состояния в примере на рис. 5,а. При движении заряд в примере на рис. 5,б испытывает колебания своей формы, его характерный размер сначала совпадает с характерным размером начального заряда: $d(\infty) \approx 5.0$, затем заряд постепенно преобразуется в полярон, его характерный размер приближается со временем к $d(\infty) \approx 4.0$. В примере на рис. 5,в начальный заряд расположен близко к центру цепочки и его скорость значительно меньше, чем для случая представленного на рис. 5,б. Аналогичным образом ведут себя и поляроны, расположенные в разных местах цепочки (см. [27]).

Если в начальный момент времени взять заряд такого же вида, как на рис. 5,б и рис. 5,в, и помещать его в цепочку в разные места, например последовательно двигать от одного конца цепочки до другого, то можно наблюдать различные варианты движения. Например, из некоторых двух соседних начальных положений заряд может двигаться в разные стороны. Заряд в некоторых случаях может не сразу начать движение, а сначала некоторое время постоять на месте, как на рис. 5,в. Максимальную скорость имеет заряд, стартовавший от конца цепочки, как рис. 5,а. При небольшом удалении начального заряда от конца цепочки

скорость заряда уменьшается по мере удаления заряда от конца цепочки, но затем скорость не изменяется пропорционально удалению начального заряда от конца цепочки. Изменение длины цепочки тоже приводит к изменению характера движения заряда. В целом характер движения заряда аналогичен движению заряда из начального полярона или вытянутого поляронного состояния в цепочке при отсутствии электрического поля.

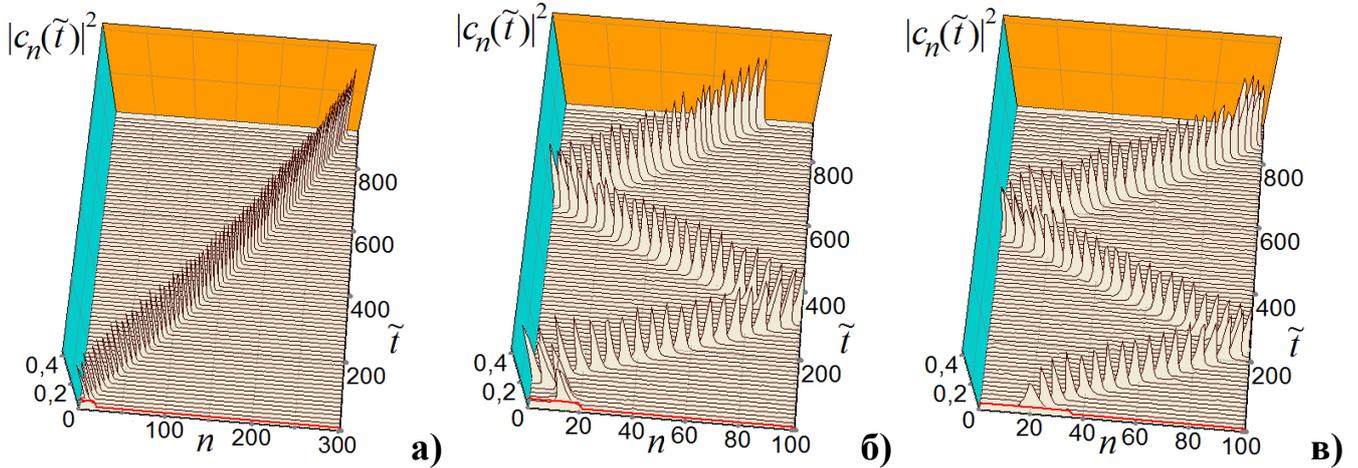


Рис. 6. Графики функций $|c_n(\tilde{t})|^2$ при различных начальных возбуждениях в цепочке. Начальные возбуждения обусловлены смещением сайтов из положений равновесия и расположены у края цепочки. Заряд распределён равномерно на смещённых сайтах. На графиках а) и б) смещено по 20 сайтов, на графике в) смещено 35 сайтов. Каждый сайт смещён на величину $q_n(0) = -0.1$. Длина цепочки на графике а) равна 301 сайт, на графиках б) и в) – 101 сайт.

В примерах, представленных на рис. 6, в начальный момент времени заряд распределён равномерно на смещённых сайтах, расположенных у края цепочки. Показаны примеры движения заряда из двух вариантов начальных зарядов, которые отличаются друг от друга количеством сайтов, смещённых в начальный момент времени. Величина смещения каждого сайта во всех примерах на рис. 6 выбрана одинаковой, отрицательной и равной -0.1 : $q_n(0) = -0.1$.

В примерах на рис. 6,а и рис. 6,б в начальный момент времени смещено по двадцать сайтов, расположенных на конце цепочки: $q_1(0) = \dots = q_{20}(0) = -0.1$. Заряд в начальный момент времени равномерно распределён на этих же сайтах: $c_1(0) = \dots = c_{20}(0) = 1/\sqrt{20}$. Условия в указанных примерах различаются только заданной длиной цепочек: на рис. 6,а длина цепочки равна 301 сайт, на рис. 6,б – 101 сайт. Графики функции $|c_n(\tilde{t})|^2$, представленные на рис. 6,а и рис. 6,б, показывают, что начальный заряд быстро принимает форму, близкую к форме полярона, и движется по цепочке, хорошо сохраняя свою форму и со временем переходя в устоявшийся полярон. В начальный момент движения заметны небольшие различия в поведении зарядов в цепочках различной длины на рис. 6,а и рис. 6,б. Поскольку в цепочке есть трение ($\Gamma = 0.001$), движение замедляется и со временем заряд остановится. Скорости движения заряда из одинаковых начальных

условий в цепочках с одинаковыми параметрами, но различной длины практически совпадают, см. рис. 6,а и рис. 6,б, в обоих случаях заряд проходит примерно по 300 сайтов за показанное безразмерное время $\tilde{t} = 900$.

С увеличением ширины начального распределения заряда по сайтам, замедляется и усложняется переход начального заряда в форме “ступеньки” в поляронное состояние. На рис. 6,в в начальный момент времени смещено 35 сайтов на конце цепочки: $q_1(0) = \dots = q_{35}(0) = -0.1$, соответственно $c_1(0) = \dots = c_{35}(0) = 1/\sqrt{35}$. График функции $|c_n(\tilde{t})|^2$ и в этом случае показывает, что начальный заряд быстро принимает форму, близкую к форме полярона, несмотря на то, что характерный размер начального заряда равен 35, а характерный размер полярона для заданных параметров цепочки равен 4.

При дальнейшем увеличении ширины начального распределения заряда, заряд уже не может быстро перейти в поляронное состояние. На всех трёх графиках, представленных на рис. 7, ширина начального распределения заряда равна 45, а именно: $q_1(0) = \dots = q_{45}(0) = -0.1$, $c_1(0) = \dots = c_{45}(0) = 1/\sqrt{45}$. Графики функции вероятности распределения заряда $|c_n(\tilde{t})|^2$ рис. 7,а и рис. 7,б показывают, что начальный заряд сразу распадается на две части, которые двигаются по цепочке. Поскольку на рис. 7,а цепочка короткая, её длина 101 сайт, то заряд отражается от правого конца цепочки и две части заряда сливаются, и далее функция распределения заряда имеет один пик. При этом на рис. 7,а хорошо видно значительное возмущение всей цепочки и бóльшие, чем на рис. 6, значения функции распределения заряда вне основного пика функции.

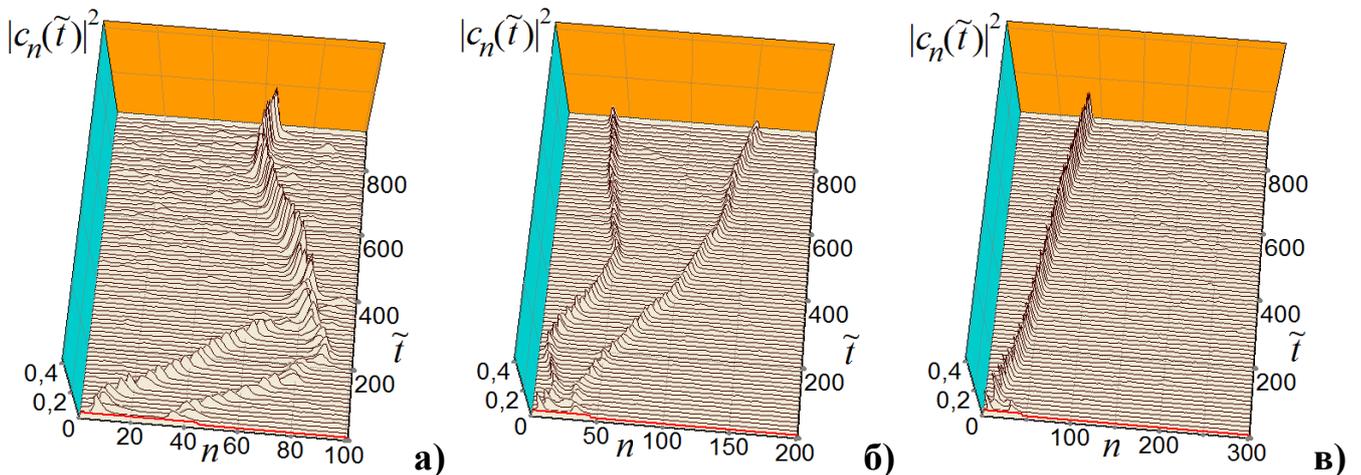


Рис. 7. Графики функций $|c_n(\tilde{t})|^2$ при одинаковых начальных возбуждениях в цепочках различной длины. Начальные возбуждения обусловлены смещением 45 сайтов из положений равновесия у края цепочки. Заряд распределён равномерно на смещённых сайтах. Каждый сайт смещён на величину $q_n(0) = -0.1$. На графике а) длина цепочки равна 101 сайт, на графике б) – 201 сайт, на графике в) – 301 сайт.

Если начальный заряд в форме “ступеньки” быстро преобразуется в близкую к полярону форму, то с увеличением длины цепочки никаких существенных

изменений в поведении и движении заряда не происходит. Это хорошо видно на рис. 6,а и рис. 6,б, на которых представленные примеры отличаются только длиной цепочек: 301 сайт и 101 сайт. В этих двух примерах заряд движется по цепочкам практически с одинаковой скоростью. Характерный размер зарядов в конце безразмерного времени, показанного на этих рисунках, одинаковый и примерно равен 5, то есть уже достаточно близок к характерному размеру полярона.

Если начальный заряд не сразу переходит в поляронное состояние, то с увеличением длины цепочки могут наблюдаться различные изменения в поведении и движении заряда, см. рис. 7. На рис. 7 показаны три примера для цепочек, длина которых различается значительно. Если увеличивать длину цепочки не на 100 сайтов, как на рис. 7, а прибавлять к цепочке, например, по 10 сайтов, то и в этих случаях можно наблюдать подобные чередования изменения поведения заряда, как показано на рис. 7.

Далее покажем примеры движения заряда в цепочках с другими значениями безразмерных параметров связи электрона и решётки.

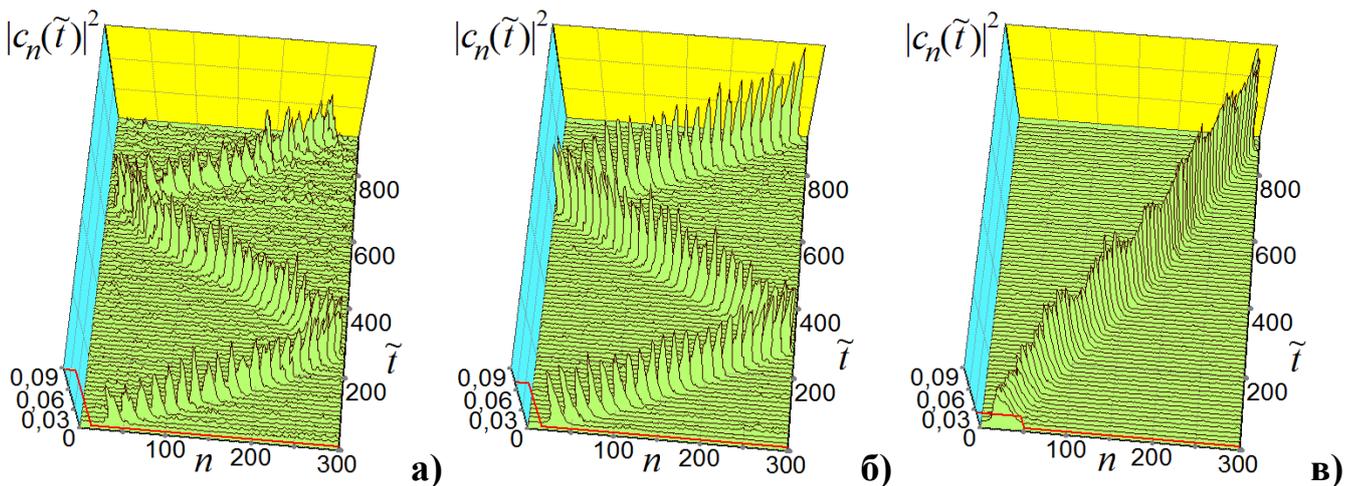


Рис. 8. Графики функций $|c_n(\tilde{t})|^2$ при различных начальных возбуждениях в цепочке. Цепочка с безразмерными параметрами связи электрона и решётки $\chi_{el} = 17.$, $\chi_h = 1$. Начальные возбуждения обусловлены смещением сайтов из положений равновесия и расположены у края цепочки. На графике а) смещено 6 сайтов, заряд распределён равномерно на 12 сайтах у края цепочки. На графике б) смещено 15 сайтов, на графике в) смещено 50 сайтов, заряд распределён равномерно на смещённых сайтах. Длина цепочки равна 301 сайт.

В примерах, представленных на рис. 8, была выбрана цепочка с безразмерными параметрами связи электрона и решётки $\chi_{el} = 17.$, $\chi_h = 1$. Характерный размер полярона в такой цепочке $d(\infty) \approx 15.0$, максимальное безразмерное смещение сайтов в центре полярона отрицательное и равно примерно -0.09 . В примере на рис. 8,а смещено 6 крайних сайтов: $q_1(0) = \dots = q_6(0) = -0.2$, а заряд распределён равномерно не только на этих шести смещённых сайтах, но и на следующих соседних шести сайтах, то есть заряд распределён равномерно на 12

сайтах: $c_1(0) = \dots = c_{12}(0) = 1/\sqrt{12}$. Графики функции $|c_n(\tilde{t})|^2$, представленные на рис. 8,а, демонстрируют движение заряда по возмущённой цепочке в виде поляронного состояния с характерным размером распределения заряда в пределах от 30 до 60. Несмотря на такое широкое поляронное состояние (по сравнению с размером полярона), заряд движется по цепочке достаточно быстро.

Начальные условия формирования заряда на рис. 8,б выбраны с учётом характеристик полярона для цепочки заданными параметрами. А именно: заряд распределён равномерно на 15 смещённых сайтах у края цепочки. Таким образом: $q_1(0) = \dots = q_{15}(0) = -0.1$, $c_1(0) = \dots = c_{15}(0) = 1/\sqrt{15}$. В этом случае заряд сразу переходит в поляронное состояние с характерным размером распределения заряда $d(\tilde{t}) \approx 24$, и в конце показанного периода времени $\tilde{t} = 900$ характерный размер заряда $d(\tilde{t}) \approx 20$. Заметим, что если в примере на рис. 8,а задать начальные смещения тех же шести сайтов не $q_n(0) = -0.2$, а такие же, как на рис. 8,б, $q_n(0) = -0.1$, то характер движения заряда будет таким же, как на рис. 8,б, даже с несколько большей скоростью.

На рис. 8,в задано отрицательное смещение 50 сайтов у края цепочки, $q_1(0) = \dots = q_{50}(0) = -0.02$, на этих сайтах равномерно распределён заряд: $c_1(0) = \dots = c_{50}(0) = 1/\sqrt{50}$. В этом случае заряд движется медленнее, но в процессе движения характерный размер заряда быстро уменьшается от заданного в начальный момент времени $d(0) \approx 50$ к $d(\tilde{t}) \approx 20$ в конце показанного периода безразмерного времени $\tilde{t} = 900$.

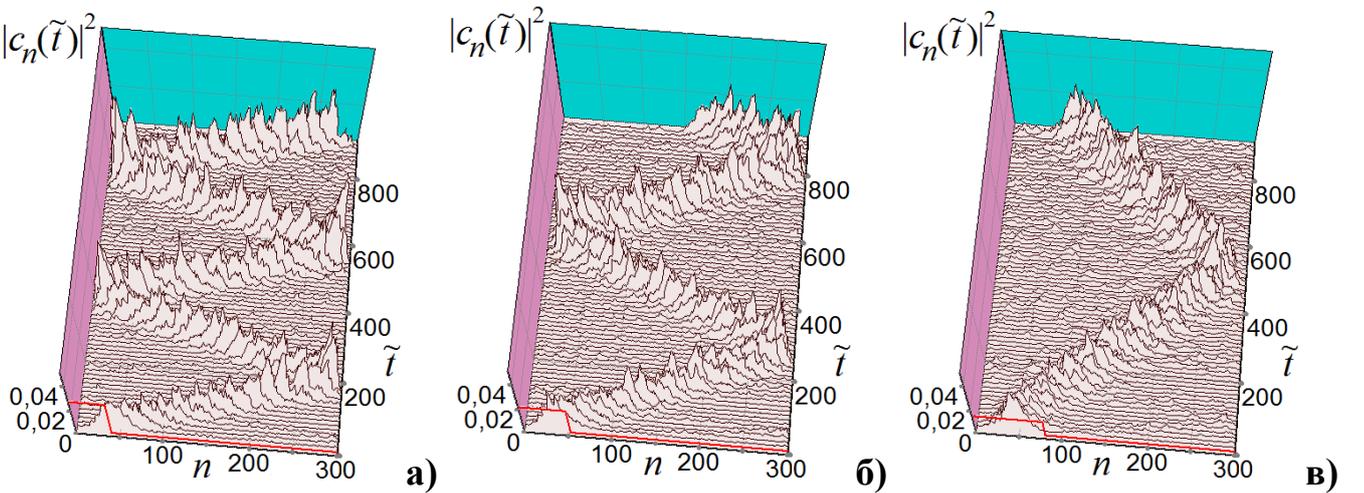


Рис. 9. Графики функций $|c_n(\tilde{t})|^2$ при различных начальных возбуждениях в цепочке. Цепочка с безразмерными параметрами связи электрона и решётки $\chi_{el} = 8.5$, $\chi_h = 0.5$. Начальные возбуждения обусловлены смещением сайтов из положений равновесия и расположены у края цепочки. На графике а) смещено 20 сайтов, заряд распределён равномерно на 40 сайтах у края цепочки. На графике б) смещено 52 сайтов, на графике в) смещено 80 сайтов, заряд распределён равномерно на смещённых сайтах. Каждый сайт смещён на величину $q_n(0) = -0.015$. Длина цепочки равна 301 сайт.

В примерах, представленных на рис. 9, выбрана цепочка с такими безразмерными параметрами, которые соответствуют цепочке ДНК, а именно: $\tau_e = 18$, $\omega_{bond} = 0.2$, $\Gamma = 0.084$, $\rho = 0.5$, $\kappa = 0.08$ – и безразмерными параметрами связи электрона и решётки $\chi_{el} = 8.5$ и $\chi_h = 0.5$ (см. [21]).

Характерный размер полярона $d(\infty)$ вида (5) в такой цепочке примерно равен 52., или в размерном виде $d(\infty) \approx 52 \cdot 3.5 \text{ \AA} \approx 182 \text{ \AA}$. Максимальное отрицательное безразмерное смещение сайтов в центре полярона равно примерно -0.015 . Во всех трёх примерах каждый выбранный сайт смещён на величину $q_n(0) = -0.015$ в начальный момент времени. Безразмерному смещению сайта на величину $q_n(0) = -0.015$ соответствуют размерные относительные смещения нуклеотидов от их равновесного положения $r \approx 0.318 \cdot q \text{ \AA} \approx -0.0048 \text{ \AA}$.

На рис. 9,а, как и на рис. 8,а, в начальный момент времени количество смещённых сайтов не совпадает с количеством сайтов, на которых распределён заряд. На рис. 9,а заряд распределён равномерно на 40 сайтах у края цепочки, а смещено только 20 сайтов: $q_1(0) = \dots = q_{20}(0) = -0.015$. На рис. 9,б начальные условия формирования заряда выбраны с учётом характеристик полярона для выбранной цепочки. А именно: заряд распределён равномерно на 52 смещённых сайтах у края цепочки. На рис. 9,в выбрано “широкое” начальное распределение: заряд распределён равномерно на 80 крайних сайтах цепочки. Во всех трёх случаях из начального “ступенчатого” заряда быстро формируется заряд в форме поляронного состояния, который движется по цепочке. Также во всех случаях характерный размер движущегося заряда колеблется в пределах от $d(\tilde{t}) \approx 70$ до $d(\tilde{t}) \approx 80$ в течение показанного на рис. 9 безразмерного времени. На рисунках 9,а и 9,б хорошо видно, как в моменты отражения заряда от края цепочки заряд становится уже и выше, в эти моменты характерный размер заряда принимает значения $d(\tilde{t}) \approx 40$, то есть меньше, чем характерный размер полярона для данной цепочки.

6. Выводы

В работах [27] и [28] был рассмотрен поляронный перенос заряда в результате взаимодействия полярона с концом цепочки при отсутствии дополнительных возбуждений в цепочке и в результате взаимодействия полярона с внешними нелинейными возбуждениями сайтов в начальный момент времени. В этих работах в начальный момент времени в цепочку помещался полярон или поляронное состояние уже или шире полярона. В данном случае в начальный момент времени в цепочку помещается не полярон, а заряд, локализованный на нескольких сайтах с одинаковыми отрицательными начальными смещениями. Причём сайты, на которых локализован заряд, могут не совпадать со смещёнными сайтами полностью, а лишь частично, кроме того смещённые сайты не обязательно должны быть смежными. В данной работе моделирование движения заряда выполнялось на основе модели Пейрарда-Бишопа-Доксуа-Холстейна (ПБДХ).

В представленной работе был рассмотрен простой способ быстрого формирования поляронного состояния в цепочке за счёт смещений из положений равновесия определённого числа соседних сайтов (или частиц) при локализации волновой функции электрона в области смещённых сайтов. Такое возбуждение вносится в цепочку в начальный момент времени. Стимуляция движения заряда выполнялась несимметричным расположением заряда в цепочке и/или ненулевыми значениями скоростей сайтов цепочки в начальный момент времени.

Для моделирования движения заряда в цепочке мы использовали три различных варианта цепочек. Один вариант: цепочка с безразмерными параметрами связи электрона и решётки $\chi_{el} = 42.5$, $\chi_h = 2.5$. Полярон в такой цепочке имеет характерный размер $d(\infty) \approx 4.0$. Второй вариант: цепочка с безразмерными параметрами связи электрона и решётки $\chi_{el} = 17.$, $\chi_h = 1.$, характерный размер полярона для этой цепочки $d(\infty) \approx 15.0$. Третий вариант: цепочка с безразмерными параметрами связи электрона и решётки $\chi_{el} = 8.5$, $\chi_h = 0.5$. В этом случае полярон располагается на достаточно большом количестве сайтов: $d(\infty) \approx 52$. Графики указанных поляронов представлены на рисунке 1. При всех выбранных параметрах цепочек показанный в работе способ задания заряда на определённом количестве смещённых сайтов обеспечивает возможность быстрого формирования поляронного состояния, движущегося по цепочке.

Показано, что для быстрого формирования поляронного состояния, как движущегося, так и стационарного, задаваемые начальные условия должны соответствовать параметрам полярона, который образуется в цепочке при выбранных параметрах. В этом случае функция смещений сайтов $q_n(\tilde{t})$ и функция распределения заряда по цепочке $|c_n(\tilde{t})|^2$ демонстрируют быстрый переход заряда в поляронное состояние, которое со временем переходит в полярон.

Библиографический список

1. Lakhno V.D., DNA nanobioelectronics. *Int. Quantum. Chem.* 2008. V. 108. P. 1970–1981. <http://dx.doi.org/10.1002/qua.21717>
2. Nanobioelectronics - for Electronics, Biology and Medicine., Eds. Offenhausser A. Rinald R. N. Y.: Springer. 2009.
3. Eudres R.G., Cox D.L., Singh R.R.P., Colloquium: The quest for high-conductance DNA. *Rev. Mod. Phys.* 2004. V. 76. P. 195–214. <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.76.195>
4. Taniguchi M., Kawai T., DNA electronics. *Physica E.* 2006. V. 33. P. 1–12. <http://dx.doi.org/10.1016/j.physe.2006.01.005>
5. Porath D., Cuniberti G., Di Felice R., Charge transport in DNA-based devices. *Top. Curr. Chem.* 2004. V. 237. P. 183–227. <http://dx.doi.org/10.1007/b94477>

6. Shinwari M.W., Deen M.J., Starikov E.B. and Cuniberti G., Electrical Conductance in Biological Molecules. *Advanced Functional Materials*. 2010. V. 20. №12. P. 1865–1883. <https://doi.org/10.1002/adfm.200902066>
7. Шигаев А.С., Пономарев О.А., Лахно В.Д., Теоретические и экспериментальные исследования открытых состояний ДНК. *Математическая биология и биоинформатика*. 2013. Т. 8. №2. С. 553–664. doi: 10.17537/2013.8.553
8. Peyrard M., Cuesta-Lopez S., James G., Modelling DNA at the mesoscale: a challenge for nonlinear science? *Nonlinearity*. 2008. V. 21. P. 91–100. <https://doi.org/10.1088/0951-7715/21/6/T02>
9. Zamora-Sillero E., Shapovalov A.V., Esteban F.J., Formation, control and dynamics of N localized structures in the Peyrard-Bishop model. *Phys. Rev. E*. 2007. V. 76. P. 066603. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.76.066603>
10. Starikov E.B., Electron–phonon coupling in DNA: a systematic study. *Philosophical Magazine*. 2005. V. 85. P. 3435–3462. doi: <https://doi.org/10.1080/14786430500157110>
11. Maniadis P., Kalosakas G., Rasmussen K.O., Bishop A.R., ac conductivity in a DNA charge transport model. *Phys. Rev. E*. 2005. V. 72. P. 021912. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.72.021912>
12. Komineas S., Kalosakas G., Bishop A.R., Effects of intrinsic base-pair fluctuations on charge transport in DNA. *Phys. Rev. E*. 2002. V. 65. P. 061905. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.65.061905>
13. Shigaev A.S., Ponomarev O.A., Lakhno V.D., A new approach to microscopic modeling of a hole transfer in heteropolymer DNA. *Chemical Physics Letters*. 2011. V. 513. P. 276–279. doi: 10.1016/j.cplett.2011.07.080
14. Hennig D., Starikov E. B., Archilla J. F. R., Palmero F., Charge Transport in Poly(dG)–Poly(dC) and Poly(dA)–Poly(dT) DNA Polymers. *Journal of Biological Physics*. 2004. V. 30. №3. P. 227. <https://doi.org/10.1023/B:JOBP.0000046721.92623.a9>
15. 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. №29. P. 4331–4357. DOI: 10.1142/S0217979205032802
16. 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. <http://dx.doi.org/10.1016/j.physe.2014.02.025>

17. 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. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2010-10565-2>
18. Berashevich J.A., Bookatz A.D., Chakraborty T., The electric field effect and conduction in the Peyrard-Bishop-Holstein model. *J. Phys.: Condens. Matter.* 2008. V. 20. P. 035207. doi:10.1088/0953-8984/20/03/035207
19. Diaz E., Lima R.P.A., Dominguez-Adame F., Bloch-like oscillations in the Peyrard-Bishop-Holstein model. *Phys. Rev. B.* 2008. V. 78. P. 134303. DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.134303>
20. Rakhmanova S.V., Conwell E.M., Polaron Motion in DNA. *J. Phys. Chem. B.* 2001. V. 105. P. 2056. DOI: 10.1021/jp0036285
21. Лахно В.Д., Четвериков А.П., Возбуждение бабблов и бризеров в ДНК и их взаимодействие с носителями заряда. *Математическая биология и биоинформатика.* 2014. Т. 9. №1. С. 4–19. doi: 10.17537/2014.9.4
22. Chetverikov A.P., Ebeling W., Lakhno V.D., Shigaev A.S., Velarde M.G., On the possibility that local mechanical forcing permits directionally-controlled long-range electron transfer along DNA-like molecular wires with no need of an external electric field - Mechanical control of electrons. *Eur. Phys. J. B.* 2016. V. 89. P. 101. <http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2016-60949-1>
23. Lakhno V.D., Soliton-like Solutions and Electron Transfer in DNA. *J. Biol. Phys.* 2000. V. 26. P. 133 DOI: 10.1023/A:1005275211233
24. Conwell E.M., Rakhmanova S.V., Polarons in DNA. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2000. V. 97. P. 4556. DOI: 10.1073/pnas.050074497
25. Fialko N.S., Lakhno V.D., Nonlinear dynamics of excitations in DNA. *Phys. Lett. A.* 2000. V. 278. P. 108. DOI: 10.1016/S0375-9601(00)00755-6
26. 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
27. Коршунова А.Н., Лахно В.Д., Особенности движения полярона в молекулярных полинуклеотидных цепочках конечной длины. *Математическая биология и биоинформатика.* 2016. Т. 11. №2. С. 141–158. doi: 10.17537/2016.11.141
28. Коршунова А.Н., Лахно В.Д., Особенности движения полярона в молекулярных полинуклеотидных цепочках конечной длины при наличии в цепочке локализованных возбуждений *Математическая биология и биоинформатика.* 2017. Т. 12, №1, С. 204–223. doi: 10.17537/2017.12.204

29. Dauxois T., Peyrard M., Bishop A.R., Dynamics and thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation. *Phys. Rev. E*. 1993. V. 47. P. 684. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.47.684>
30. Peyrard M., Bishop A.R., Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation. *Phys. Rev. Lett.* 1989. V. 62. P. 2755–2758. doi:10.1103/PhysRevLett.62.2755
31. Peyrard M., Using DNA to probe nonlinear localized excitations? *Europhys. Lett.* 1998. V. 44. P. 271–277. doi: 10.1209/epl/i1998-00469-9
32. Choi C.H., Kalosakas G., Rasmussen K.O., Hiromura M., Bishop A.R., Usheva A., DNA dynamically directs its own transcription initiation. *Nucleic Acids Res.* 2004. V. 32. №4. P. 1584–1590. doi: 10.1093/nar/gkh335
33. 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
34. 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

Оглавление

1	Введение	3
2	Математическая модель	4
3	Формирование поляронного состояния в цепочке	5
4	Движение заряда, расположенного в центре цепочки, обусловленное наличием локализованных возбуждений	8
5	Движение заряда, обусловленное положением заряда в цепочке, при отсутствии локализованных возбуждений	12
6	Выводы	18
	Библиографический список	19