

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиофизики и нелинейной динамики

**Исследование эволюции волновой функции электрона,
взаимодействующего с нелинейными волнами в нуклеотидной цепочке**

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

студентки 2 курса 2232 группы
направления 03.04.03 Радиофизика
Института физики
Казаковой Елизаветы Ильиничны

Научный руководитель
профессор, д.ф.-м.н., профессор _____ А.П. Четвериков

Зав. кафедрой радиофизики
и нелинейной динамики,
д.ф.-м.н., доцент _____ Г.И. Стрелкова

Саратов 2021

ВВЕДЕНИЕ

Одним из основных элементов нанобиоэлектроники являются молекулярные проводники, состоящие из длинных органических молекул. Среди них особенно выделяют молекулу ДНК, она рассматривается как один из потенциальных проводников электрических зарядов, используемых для соединения различных элементов биомолекулярных цепей. Помимо традиционного поляронного механизма транспорта электрона вдоль молекулы ДНК в последнее время часто рассматривается механизм проводимости, основанный на нелинейных свойствах ДНК и не требующий для реализации наличия внешнего электрического поля. Суть этого механизма заключается в том, что транспорт электрона осуществляется в потенциальной ловушке нелинейного дискретного бризера, возбуждаемого в цепочке нуклеотидных пар ДНК. Дискретный бризер – это локализованные в пространстве и периодические по времени колебания нелинейных дискретных решеток осцилляторов.

Возможность электрона и мобильного бризера, возбуждаемого в молекуле за счет сжатия молекулы около ее закрепленного конца, образовывать заряженную квазичастицу, перемещающуюся вдоль оси молекулы за счет начального импульса бризера, уже была показана. При таком механизме транспорта электрон либо с самого начала локализуется в потенциальной яме бризера, либо он изначально локализован в потенциальной яме-ловушке неоднородного статического профиля распределения энергии электрона, а после возбуждения бризера возможно туннелирование электрона в потенциальную яму бризера, если расстояние между ямами не слишком большое.

В настоящей работе для исследования характеристик процесса туннелирования электрона между потенциальной ямой профиля энергии электрона и потенциальной ямой мобильного бризера предварительно был проведен ряд компьютерных экспериментов, моделирующих процесс туннелирования электрона между стационарными ямами «донора» и «акцептора» в невозмущенной цепочке с закрепленными концами для

определения характерных масштабов процесса туннелирования в рассматриваемой цепочке, прежде всего времени туннелирования из одной ямы в другую, а также взаимодействие мобильного дискретного бризера, возбужденного начальными смещениями нуклеотидов в цепочке с закрепленными концами, с электроном.

Цель выпускной квалификационной работы: исследование характеристик туннелирования электрона между стационарной потенциальной ямой профиля энергии электрона и движущейся потенциальной ямой мобильного бризера.

Методы исследования. Исследования проводились численно при помощи разработанной на кафедре радиофизики и нелинейной динамики программы DNA-PBDfix 8b, написанной на языке программирования Fortran и реализующей численный метод решения дифференциальных уравнений Рунге-Кутты четвертого порядка. Для визуализации результатов использовалась свободная программа Gnuplot.

Структура выпускной квалификационной работы: введение, основная часть, состоящая из трех разделов (1. Квантово-классические модели взаимодействия электрона с нелинейными волнами плотности в двойной нуклеотидной цепочке; 2. Захват и транспорт низкоэнергетического электрона мобильным бризером, сформированным начальным сжатием цепочки; 3. Взаимодействие высокоэнергетического электрона с мобильным бризером в нуклеотидной цепочке), заключение и список использованных источников.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Описание модели. Для анализа взаимодействия мобильного дискретного бризера, возбуждаемого начальными смещениями нуклеотидов, с электроном в настоящей работе рассматривается квантово-классическая модель Пейрарда-Бишопа-Доксуа-Холстейна (ПБДХ), которая является комбинацией моделей «сильной связи» Холстейна и нелинейной модели Пейрарда-Бишопа-Доксуа, с

учетом замены простого описания динамики возмущений в цепочке, принятого в модели Холстейна, на более точное. В рамках этой модели динамика нуклеотидов описывается как движение точечных частиц классическими уравнениями Ньютона, а дискретная волновая функция электрона эволюционирует в соответствии с дискретным уравнением Шредингера. Приближенная модель сильной связи ПБДХ основывается на гамильтониане

$$H = \sum_n \left\{ \frac{p_n^2}{2M} + D \left[e^{-2bx_n} - 2e^{-bx_n} \right] + \frac{k}{2} (x_n - x_{n-1})^2 (1 + \rho e^{-\alpha(x_n + x_{n-1})}) \right\} + \sum_n \left\{ (\varepsilon_n + \chi x_n) |c_n|^2 + V_0 c_n^* (c_{n+1} + c_{n-1}) \right\}, \quad (1)$$

где p_n – импульс n -ой частицы с массой M , x_n описывают смещения нуклеотида n -ой пары от их состояний равновесия. Нелинейный потенциал Морзе $V_n^M = D \left[e^{-2bx_n} - 2e^{-bx_n} \right]$ определяет взаимодействие частиц в n -ой нуклеотидной паре, в нем D – глубина потенциальной ямы, b – коэффициент жесткости связи в нуклеотидной паре. Компонент гамильтониана, содержащий межпарный параболический потенциал с нелинейной добавкой $H_{inter} = \sum_n \left\{ \frac{k}{2} (x_n - x_{n-1})^2 (1 + \rho e^{-\alpha(x_n + x_{n-1})}) \right\}$ описывает взаимодействие смежных нуклеотидных пар с номерами n и $n-1$. Гамильтониан для квантового электрона, взаимодействующего с молекулярной цепочкой, записывается в следующем виде: $H_{el} = \sum_n \left\{ (\varepsilon_n + \chi x_n) |c_n|^2 + V_0 c_n^* (c_{n+1} + c_{n-1}) \right\}$, где ε_n определяет собственную энергию электрона на n -ом сайте цепочки, c_n – компонент дискретной волновой функции электрона, V_0 – коэффициент перескока, определяющий вероятность перескока электрона с n -ой нуклеотидной пары на соседние, χ – коэффициент взаимодействия, определяющий связь электрона с возмущениями цепочки.

Из гамильтониана (1) следует уравнение движения частиц в каждой нуклеотидной паре (в безразмерных переменных, которые введены ниже)

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

и дискретное уравнение Шредингера

$$\dot{c}_n = i\tau_e (c_{n+1} + c_{n-1}) + i(\varepsilon_n^0 + \chi_{el} q_n) c_n \quad (3)$$

где $q_n = by_n$ – безразмерное смещение n -го нуклеотида (учтена симметричность движения нуклеотидов в паре) от положения равновесия $y_{n0} = 0$. Точка теперь обозначает производную по безразмерному времени $\tau = \omega_M t$, $\omega_M = (2b^2 D \cdot M^{-1})^{1/2}$ – частота линейных колебаний нуклеотидов около положения равновесия, а $\omega_{bond} = (k \cdot M^{-1})^{1/2} / \omega_M$ – безразмерная частота линейных колебаний нуклеотидов вдоль комплементарных водородных связей, ε_n^0 – потенциальный профиль энергии электрона, содержащий яму гауссовой формы глубиной E_d , шириной S_d с центром на n_d -ом нуклеотиде, $\chi_{h,el} \sim \chi$ – нормированные коэффициенты связи электрона и цепочки в уравнениях движения и Шредингера. В уравнении (2) функция f описывает нелинейность силы взаимодействия:

$$f(q_{n-1,n,n+1}) = (q_{n+1} - q_n) [1 + 0.5\alpha(q_{n+1} - q_n)] e^{-\alpha(q_{n+1} + q_n)} + (q_{n-1} - q_n) [1 + 0.5\alpha(q_{n-1} - q_n)] e^{-\alpha(q_{n-1} + q_n)} \quad (4)$$

Коэффициент α теперь нормирован $\alpha = \alpha/b$ в результате введения безразмерного смещения.

Результаты исследований. В разделе 2 представлены результаты моделирования для электрона с «низкой» энергией, то есть при $\Delta\varphi = 0$, где $\Delta\varphi$ – разность фаз соседних компонентов волновой функции, считающаяся одинаковой для всех значений n . (Как известно, при $\Delta\varphi = 0$ электрон обладает наименьшей энергией из возможных значений энергией в энергетической зоне, а при $\Delta\varphi = \pi$ – наибольшей). Основной задачей настоящей работы является изучение характеристик процесса туннелирования электрона между стационарной потенциальной ямой профиля энергии электрона и движущейся потенциальной ямой мобильного бризера, но сначала для сопоставления

получаемых в процессе моделирования данных и детального исследования характеристик туннелирования был проведен модельный эксперимент в невозмущенной цепочке, моделирующий «перекачку» волновой функции электрона между двумя стационарными потенциальными ямами «донора» и «акцептора». При этом полагалось, что ямы донора и акцептора обладают идентичными характеристиками ($E_d = E_a$, $S_d = S_a$), а центр ямы акцептора расположен на n_a -ом нуклеотиде. Расстояние между центрами двух ям обозначено как dn , а время туннелирования электрона из одной ямы в другую – t_1 . Показано, что для электрона с «низкой» энергией, время туннелирования экспоненциально растет при увеличении расстояния между ямами. При увеличении ширины ям, время туннелирования тоже растет, но уже не по экспоненте (рисунок 1). На основании полученных результатов были выявлены оптимальные с точки зрения возможности локализации электрона в яме и перемещении его между ямами значения ширины стационарных потенциальных ям донора и акцептора и их глубины. При подобранных параметрах ($E_d = E_a = 4$, $S_d = S_a = 0.6$) предельное расстояние между ямами, при котором оказалось возможным реализовать туннелирование, составило $dn_{max} = 20$. На рисунке 2 приведены типичные характеристики динамики цепочки и эволюции волновой функции электрона для этого случая.

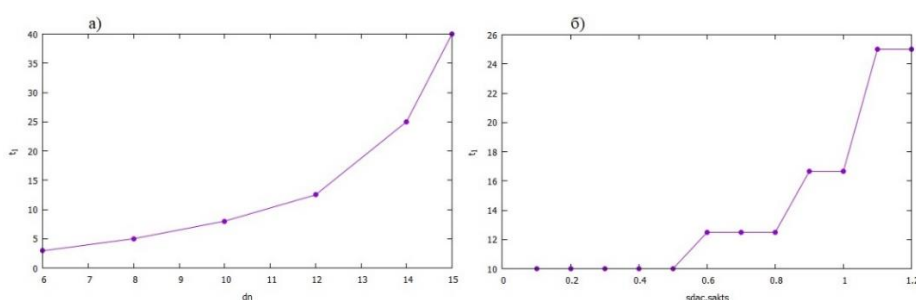


Рисунок 1 — а) Зависимость времени туннелирования электрона из одной ямы в другую от расстояния между ямами при $E_d = E_a = 5$, $S_d = S_a = 0.7$, б) зависимость времени туннелирования электрона из одной ямы в другую от ширины ям при $dn = 12$, $E_d = E_a = 5$.

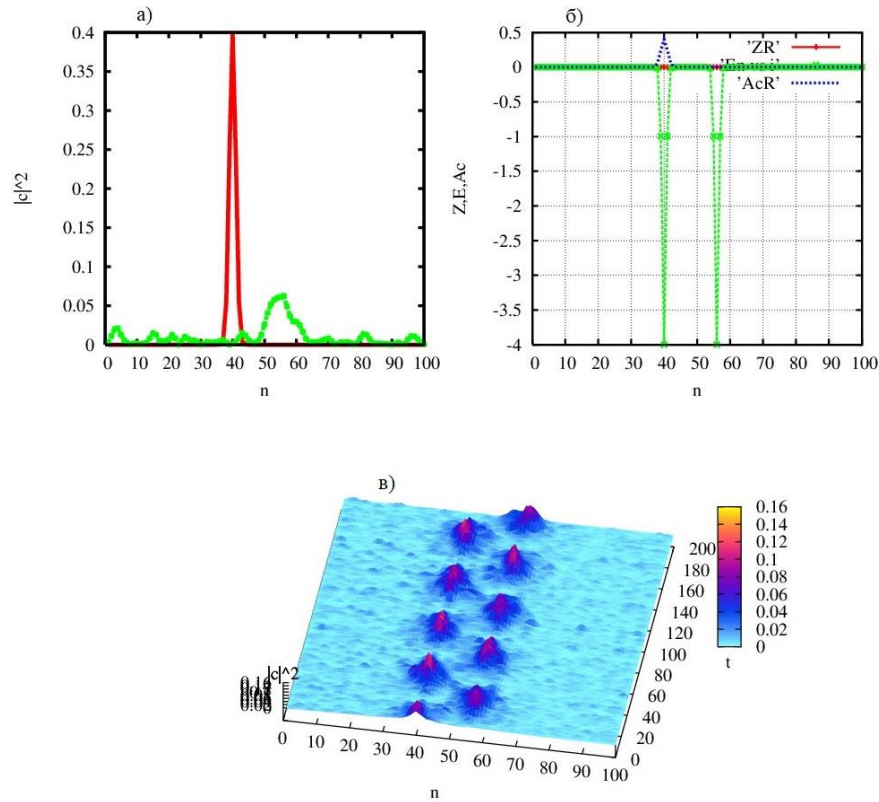


Рисунок 2 – Туннелирование электрона между двумя стационарными ямами в невозмущенной цепочке ($q_{n=1,\dots,N} = 0$) при $N = 100$, $n_d = 40$, $n_a = 56$ ($dn = 16$), $\rho = 0.5$, $\alpha = 0.08$, $\tau = 200$, $E_d = E_a = 4$, $S_d = S_a = 0.6$, $\omega_{bond} \approx 0.4$, $t_1 = 22.22$ (по результатам моделирования): а) график начального возмущения (красным) и распределение (зеленым) волновой функции электрона; б) графики начальных возмущений смещений частиц из состояния равновесия (красным), профилей потенциальных ям (зеленым) и волновых функций электрона (синим); в) эволюция распределения вероятности обнаружить электрон на n -ом нуклеотиде (эволюция распределения волновой функции электрона).

Далее было определено, к чему может привести изменение основных параметров стационарной ямы – ее глубины и ширины, а также номера нуклеотида, на котором находится центр ямы, при взаимодействии электрона с мобильным бризером. Показано, что при отдалении стационарной ямы электрона от возбуждаемых нуклеотидов (глубина и ширина при этом не изменяются), время захвата бризером электрона постепенно увеличивается, а затем захват вообще не происходит. На рисунке 3 представлены эволюции распределения волновой функции электрона при различной дислокации стационарной ямы электрона. Для случая, когда увеличивается глубина ямы, а n_d и ширина ямы остаются неизменными, показано, что захват бризером электрона происходит очень

быстро, причем время захвата увеличивается незначительно при увеличении значения глубины ямы. На рисунке 4 приведены типичные характеристики динамики системы для случая, когда центр ямы расположен на 12 нуклеотиде, а глубина ямы равна 5. Из представленных рисунков видно, что при таких параметрах время захвата брызгом электрона t_1 приблизительно равно 25.

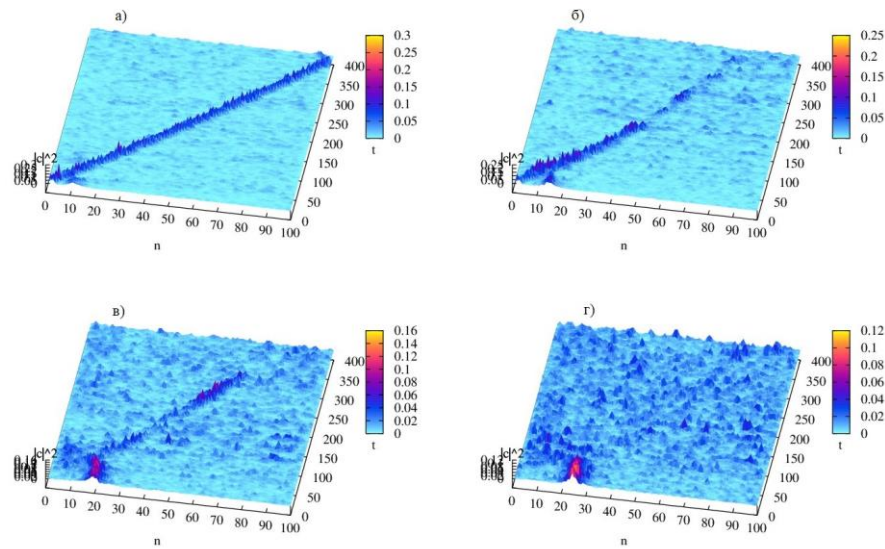


Рисунок 3 – Эволюции распределения вероятности обнаружить электрон на n -ом нуклеотиде в цепочке с возбужденным мобильным брызгом ($q_2 = q_3 = -1.5$, $q_{n \neq 2,3} = 0$) при $N = 100$, $\rho = 0.5$, $\alpha = 0.08$, $\tau=400$, $E_d = 5$, $S_d = 0.7$, $\omega_{bond} \approx 0.4$ для различной дислокации ямы: а) $n_d=11$; б) $n_d=15$; в) $n_d=20$; г) $n_d=25$.

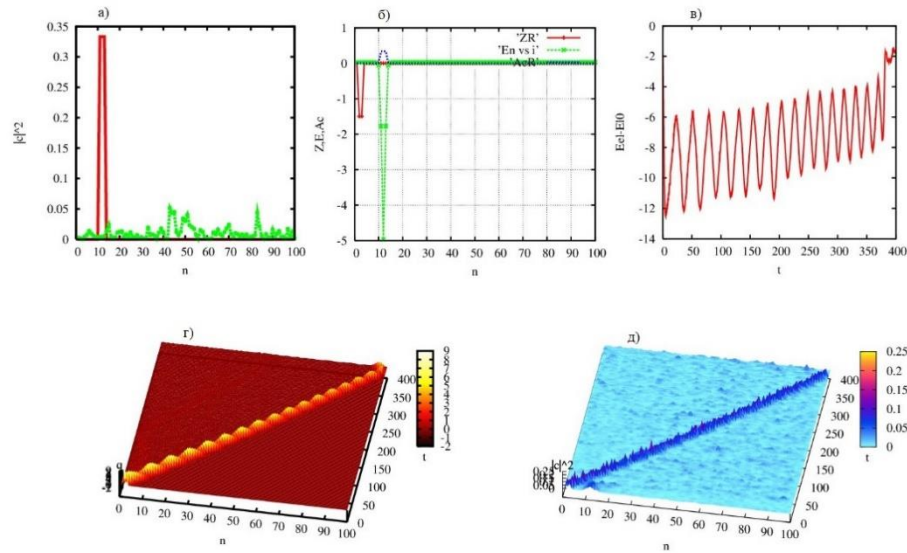


Рисунок 4 – Электрон в потенциальной яме с возбужденным мобильным бризером ($q_2 = q_3 = -1.5$, $q_{n \neq 2,3} = 0$) при $N = 100$, $n_d = 12$, $\rho = 0.5$, $\alpha = 0.08$, $\tau = 400$, $E_d = 5$, $S_d = 0.7$, $\omega_{bond} \approx 0.4$, $t_1 \approx 25$ (по результатам моделирования): а) график начального возмущения (красным) и распределение (зеленым) волновой функции электрона; б) графики начальных возмущений координат частиц (красным), профиля потенциальной ямы электрона (зеленым) и волновых функций электрона (синим); в) эволюция энергии электрона; г) эволюция распределения смещений частиц; д) эволюция распределения вероятности обнаружить электрон на n -ом нуклеотиде (эволюция распределения волновой функции электрона).

В разделе 3 для сравнения с предыдущим представлены результаты моделирования для электрона с «высокой» энергией, то есть соседние компоненты волновой функции находятся в противофазе ($\Delta\varphi = \pi$). В ходе модельного эксперимента, аналогичного, рассмотренному в разделе 2, было выявлено, что при положительных значениях глубины потенциальных ям процесс туннелирования не происходит, потому что электрон локализуется не в минимумах (ямах) профиля энергии, а на его максимумах («холмах»). Показано, что в последнем случае периодическое туннелирование также может происходить, причем наилучшие результаты были достигнуты для цепочки, в которой «глубина» стационарных потенциальных ям выбрана равной -4 . В качестве иллюстрации на рисунке 5 представлены типичные характеристики динамики цепочки при $E_d = E_a = -4$, $dn = 14$.

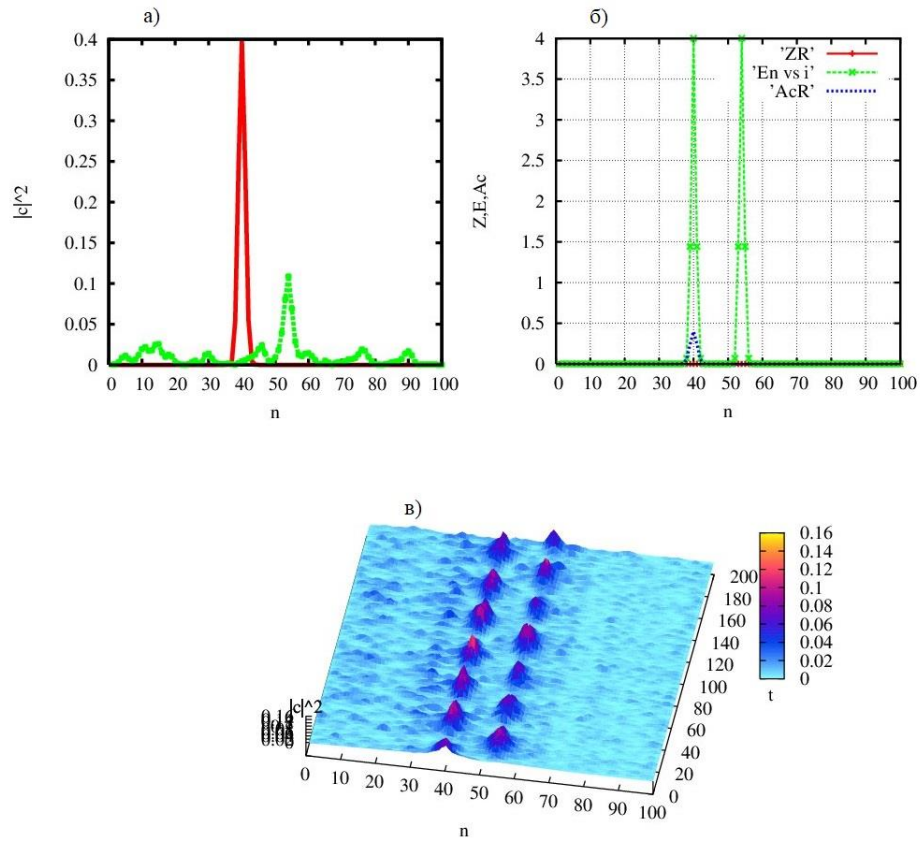


Рисунок 5 – Туннелирование электрона между двумя стационарными ямами в невозмущенной цепочке ($q_{n=1,\dots,N} = 0$) при $N = 100$, $n_d = 40$, $n_a = 54$ ($dn = 14$), $\rho = 0.5$, $\alpha = 0.08$, $\tau=200$, $E_d = E_a = -4$, $S_d = S_a = 0.7$., $\omega_{bond} \approx 0.4$, $t_1 = 15.38$ (по результатам моделирования): а) график начального возмущения (красным) и распределение (зеленым) волновой функции электрона; б) графики начальных возмущений смещений частиц из состояния равновесия (красным), профилей потенциальных ям (зеленым) и волновых функций электрона (синим); в) эволюция распределения вероятности обнаружить электрон на n -ом нуклеотиде (эволюция распределения волновой функции электрона).

При исследовании динамики взаимодействия высокоэнергетического электрона с мобильным бризером, возбужденным смещением двух частиц вблизи конца цепочки было определено, что в случае, когда электрон находится в яме с положительной глубиной, захват электрона не происходит в отличие от аналогичного случая с низкоэнергетическим электроном, а в случае, когда электрон находится на «холме», то есть рассматривается яма с отрицательной глубиной, показано, что в начале симуляции происходит перекачка волновой функции высокоэнергетического электрона, однако окончательный захват не

достигается. На рисунке 6 представлены типичные характеристики динамики цепочки для случая, когда центр ямы расположен на 17 нуклеотиде, а глубина ямы выбрана равной -4.

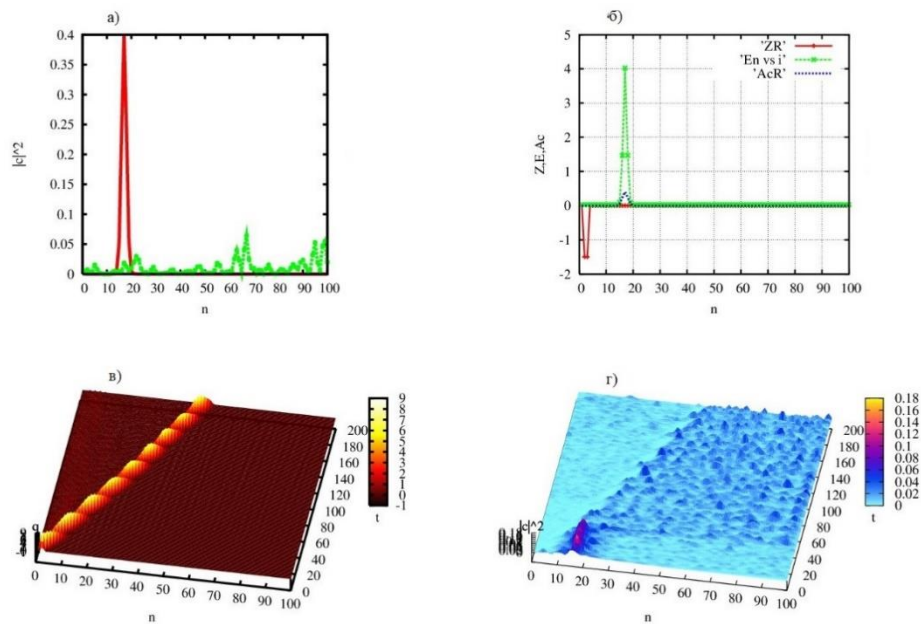


Рисунок 6 – Высокоэнергетический электрон в потенциальной яме с возбужденным мобильным брызгом ($q_2 = q_3 = -1.5$, $q_{n \neq 2,3} = 0$) при $N = 100$, $n_d = 17$, $\rho = 0.5$, $\alpha = 0.08$, $\tau = 200$, $E_d = -4$, $S_d = 0.7$, $\omega_{bond} \approx 0.4$: а) график начального возмущения (красным) и распределение (зеленым) волновой функции электрона; б) графики начальных возмущений координат частиц (красным), профиля потенциальной ямы электрона (зеленым) и волновой функций электрона (синим); в) эволюция распределения смещений частиц; г) эволюция распределения вероятности обнаружить электрон на n -ом нуклеотиде (эволюция распределения волновой функции электрона).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выпускной квалификационной работы посредством численного моделирования в рамках квантово-классической модели Пейрарда-Бишопа-Доксуа-Холстейна было проведено исследование взаимодействия низкоэнергетического и высокоэнергетического электрона с мобильным брызгом в нуклеотидной цепочке, а также изучены характеристики периодического туннелирования электрона между двумя стационарными потенциальными ямами в невозмущенной цепочке.

С помощью модельного эксперимента были определены оптимальные значения ширины и глубины стационарной потенциальной ямы профиля энергии низкоэнергетического электрона, а также предельное расстояние между ямами при этих значениях. В рамках такого же эксперимента была определена оптимальная глубина стационарной потенциальной ямы профиля энергии высокоэнергетического электрона.

Подробно изучен процесс захвата и транспорта низкоэнергетического электрона мобильным бризером – определены оптимальные характеристики стационарной потенциальной ямы профиля энергии низкоэнергетического электрона и время захвата.

Рассмотрена динамика взаимодействия высокоэнергетического электрона с мобильным бризером, однако для получения более подробной информации об этом процессе требуются дальнейшие исследования.