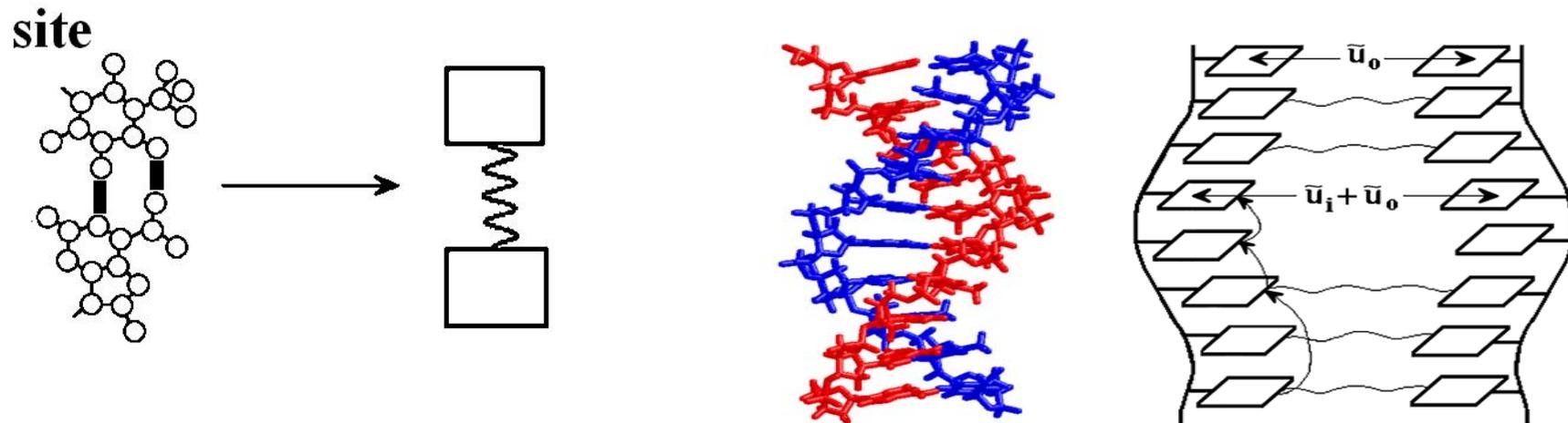


Сравнение разных способов задания температуры в полярной модели Холстейна

Надежда Фиалко,
М.М.Ольшевец,
В.Д.Лахно

Институт математических проблем биологии РАН - филиал
Федерального государственного учреждения "Федеральный
исследовательский центр Институт прикладной математики им.
М.В. Келдыша Российской академии наук"

Дискретная модель Холстейна переноса заряда в ДНК



Сайт – комплементарная
нуклеотидная пара

Квантовая частица (электрон или
дырка) движется вдоль цепочки
классических сайтов.

Смещения сайтов u_n влияют на вероятности нахождения заряда $|b_n|^2$.

Гамильтониан Холстейна

$$\hat{H} = v_{nk} |n\rangle\langle k| \quad \text{волновая функция} \quad |\Psi\rangle = \sum_n b_n |n\rangle$$

$$\begin{aligned} H &= T + U + \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \\ &= \frac{M}{2} \sum_{n=1}^N \dot{u}_n^2 + \frac{K}{2} \sum_{n=1}^N u_n^2 + \sum_{m,n} v_{mn} b_m b_n^* + \sum_n \alpha' u_n b_n b_n^*. \end{aligned}$$

$b_n(t)$ – амплитуда вероятности нахождения заряда на n -ом сайте

($b_n b_n^* = p_n$ – вероятность нахождения заряда на n -ом сайте)

$u_n(t)$ – смещение центра масс из равновесного положения

Уравнения движения в безразмерном виде для однородной цепочки

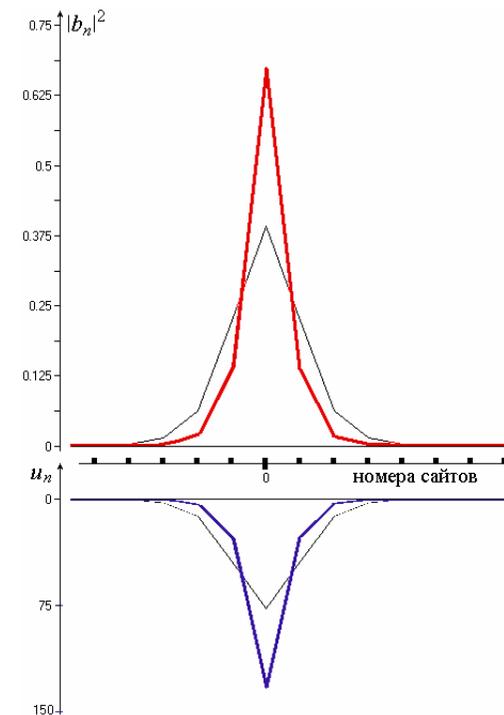
$$i\dot{b}_n = \eta(b_{n-1} + b_{n+1}) + \chi u_n b_n$$

$$\ddot{u}_n = -\omega^2 u_n - \chi |b_n|^2 + \gamma \dot{u}_n$$

$n = 1, \dots, N$; N – длина цепочки.

Параметры:

- матричные элементы перехода между сайтами η ,
- частота колебаний сайтов ω ,
- константа связи квантовой и классической подсистем χ



Полярон – состояние с
наинизшей энергией

Энергия системы

$$\begin{aligned}
 E_{\text{tot}}(t) &= E_{\eta} + E_{\chi} + E_{\text{Pot}} + E_{\text{Kin}} = \\
 &= \eta \sum (b_n b_{n+1}^* + b_{n+1} b_n^*) + \chi \sum u_n b_n b_n^* + \frac{\omega^2}{2} \sum u_n^2 + \frac{1}{2} \sum v_n^2
 \end{aligned}$$

Например, в момент $t=0$ в невозмущенной цепочке длиной N (смещения сайтов $u_n(t=0) = 0$, скорости сайтов $v_n(t=0) = 0$)

для

$$b_n(t=0) = 1/\sqrt{N} \quad E_{\text{tot}}(0) = E_{\eta} + 0 + 0 + 0 = \eta(N-1) \frac{2}{N} = 2\eta \frac{N-1}{N}$$

для

$$b_n(t=0) = (-1)^n / \sqrt{N} \quad E_{\text{tot}}(0) = -2\eta \frac{N-1}{N}$$

для

$$b_1(t=0) = 1 \quad E_{\text{tot}}(0) = 0$$

Задание температуры T

Термостат Ланжевена

$$i\dot{b}_n = \eta(b_{n-1} + b_{n+1}) + \chi u_n b_n$$

$$\ddot{u}_n = -\omega^2 u_n - \chi |b_n|^2 + \gamma \dot{u}_n + \xi Z_n(t)$$

$$\langle Z_n(t) \rangle = 0$$

$$\langle Z_n(t) Z_n(t+t') \rangle = \delta(t')$$

$$\xi = \sqrt{2E^*} \sqrt{\gamma T}$$

Гамильтонова система

$$i\dot{b}_n = \eta(b_{n-1} + b_{n+1}) + \chi u_n b_n$$

$$\dot{u}_n = v_n$$

$$\dot{v}_n = -\omega^2 u_n - \chi |b_n|^2$$

При $t = 0$ $\{u_n, v_n\}$ рассчитаны для цепочки с температурой T

$$\langle u_n(0) \rangle = 0$$

$$\langle v_n(0) \rangle = 0$$

$$\langle u_n^2(0) \rangle = E^* T / \omega^2$$

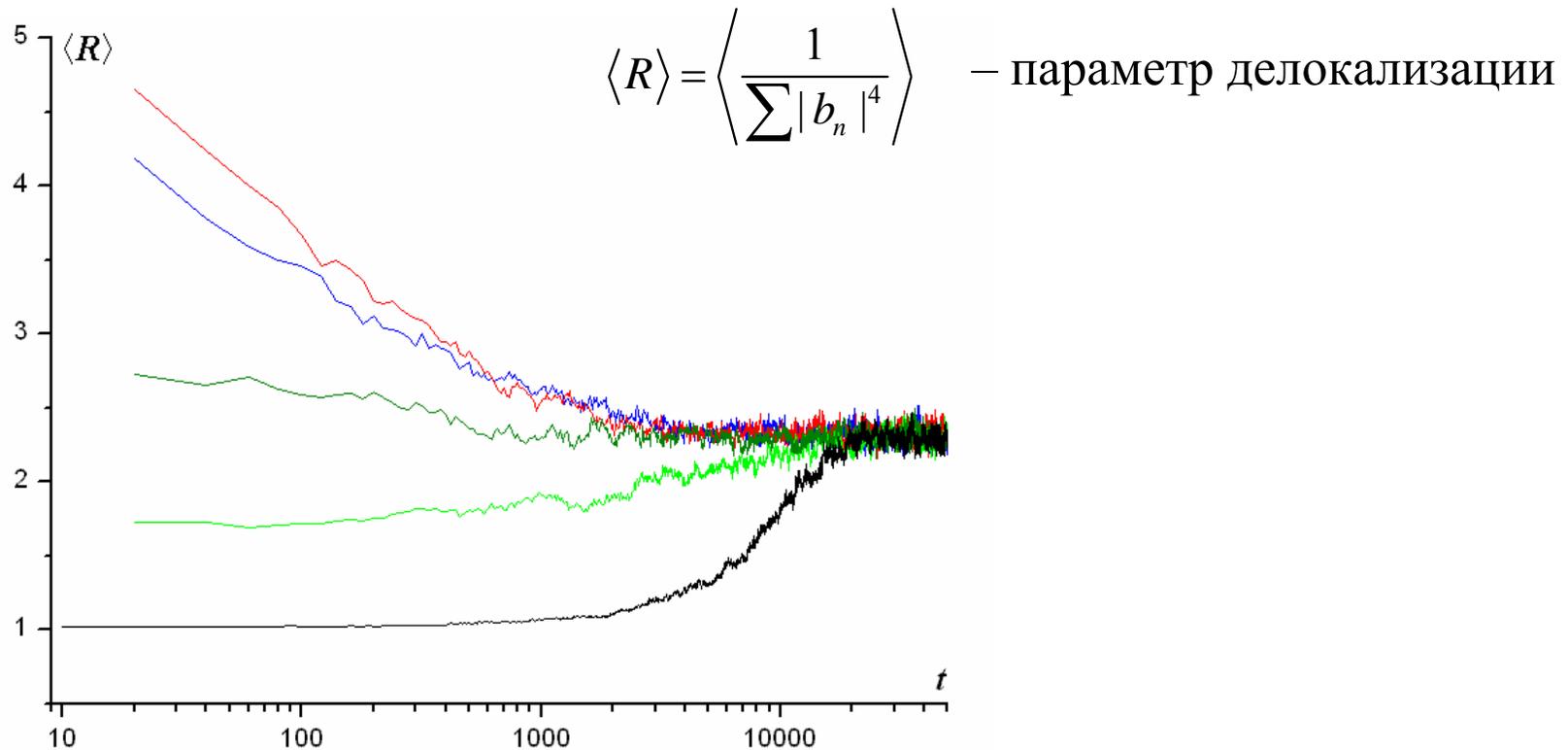
$$\langle v_n^2(0) \rangle = E^* T$$

Сохраняющиеся величины

$$\sum_{n=1}^N |b_n|^2 = 1 \quad \langle E_{\text{kin}} \rangle \approx \text{Const}$$

$$\sum_{n=1}^N |b_n|^2 = 1 \quad E_{\text{tot}} = \text{Const}$$

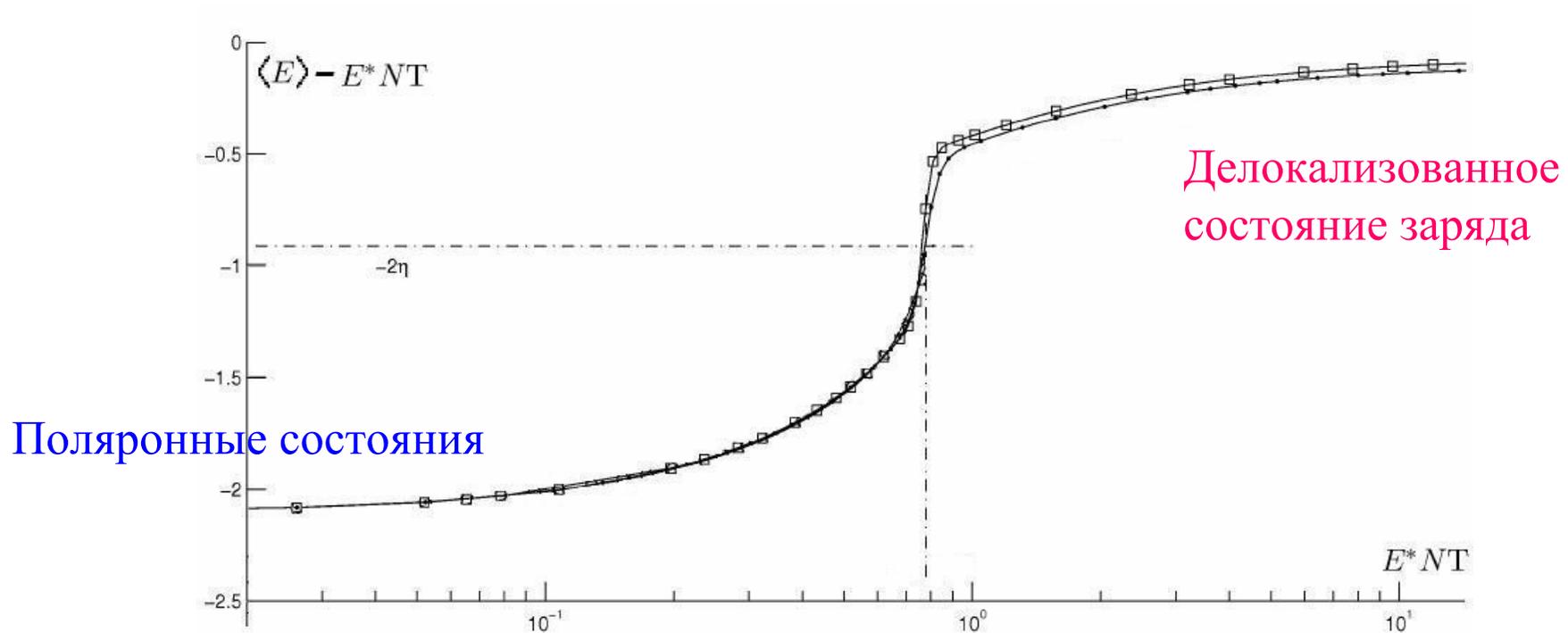
Динамика в системе со случайной силой (термостат Ланжевена)



Графики $\langle R(t) \rangle$ (средние по 50 реализациям) из разных начальных данных (НД) при одинаковой температуре. Черная (нижняя) кривая – расчет из поляронных НД, красная (вверху) – из равномерного распределения $b_n = 1/N^{1/2}$ с наибольшей энергией $E_\eta \approx |2\eta|$.

При заданной температуре из разных начальных данных приходим к одинаковому средним

Энергия в системе со случайной силой



Зависимости энергии заряда $\langle E_{\text{tot}} \rangle - E_{\text{class}}$ от энергии классической цепочки $E_{\text{class}} = E^* NT$. По оси абсцисс логарифмический масштаб. Точками обозначены результаты расчетов для $N = 40$, квадратами – для $N = 60$.

Область существования полярона зависит от энергии классической цепочки, т.е. от длины цепочки.

Начальные данные для гамильтоновой системы

При $t = 0$ $\{u_n, v_n\}$ рассчитаны для цепочки с температурой T .

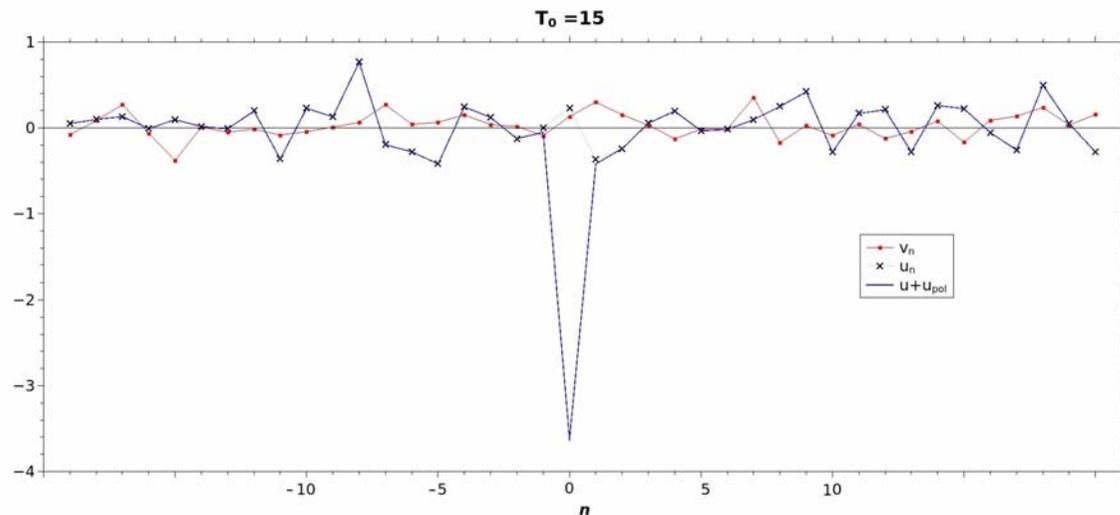
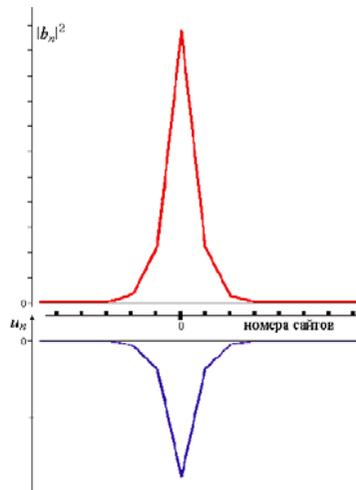
4 варианта для амплитуд вероятности:

$$b_n(t=0) = 1/\sqrt{N}; \quad b_{N/2}(t=0) = 1; \quad b_n(t=0) = (-1)^n / \sqrt{N};$$

и полярон

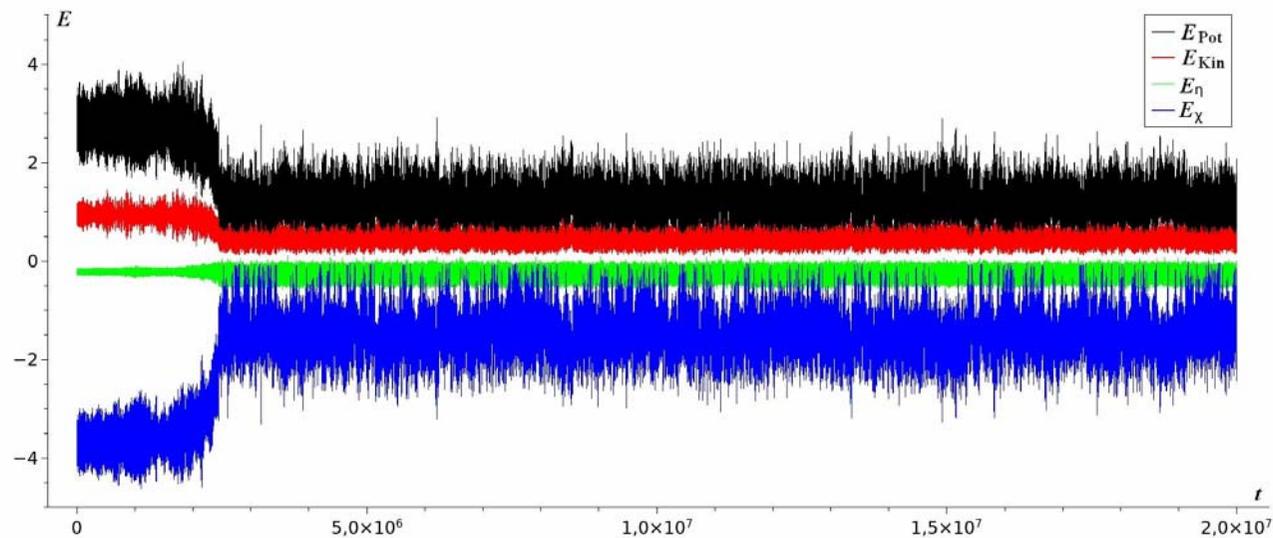
Распределение при $T=0$

$$\{b_n, U_n = u_{\text{pol}} + u_n, v_n\} (t=0)$$



Цепочки длиной $N = 40$ и $N = 80$; параметры: $\eta = 0.456$, $\omega = 0.5$, $\chi = 1$.

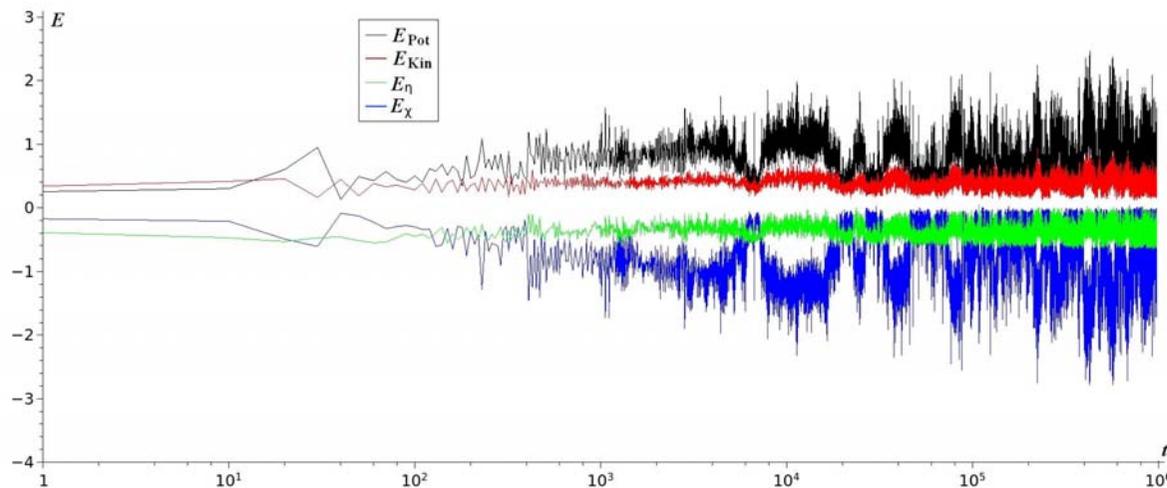
Динамика системы из одинаковых $\{u_n, v_n\}$



$T_0=40$

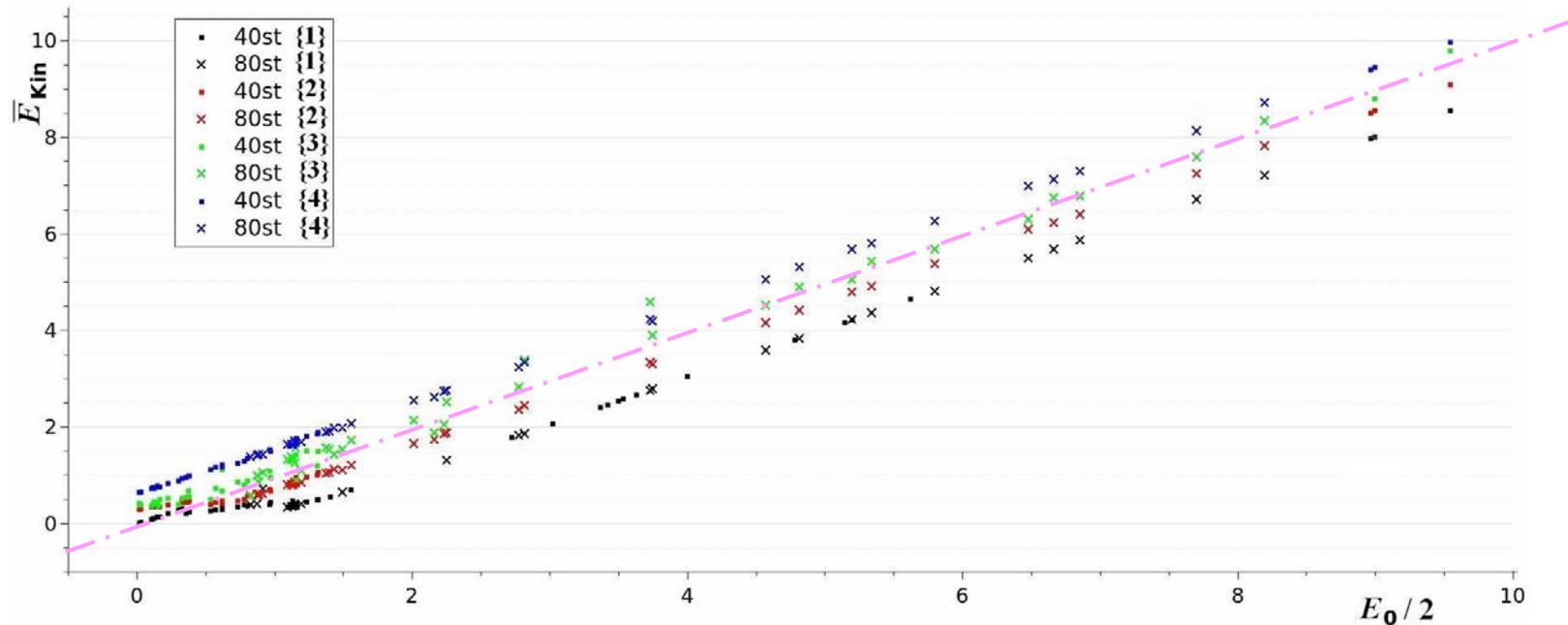
40 сайтов,
начальные
данные
полярон

Оценки средних энергий – на интервале в конце расчета



40 сайтов,
начальные
данные для
 $b_{N/2}(0) = 1$

Оценка средней кинетической энергии



Зависимость от начальной энергии цепочки $E_0 = E^*NT$. Пунктир – прямая $y = x$

Линейная аппроксимация:

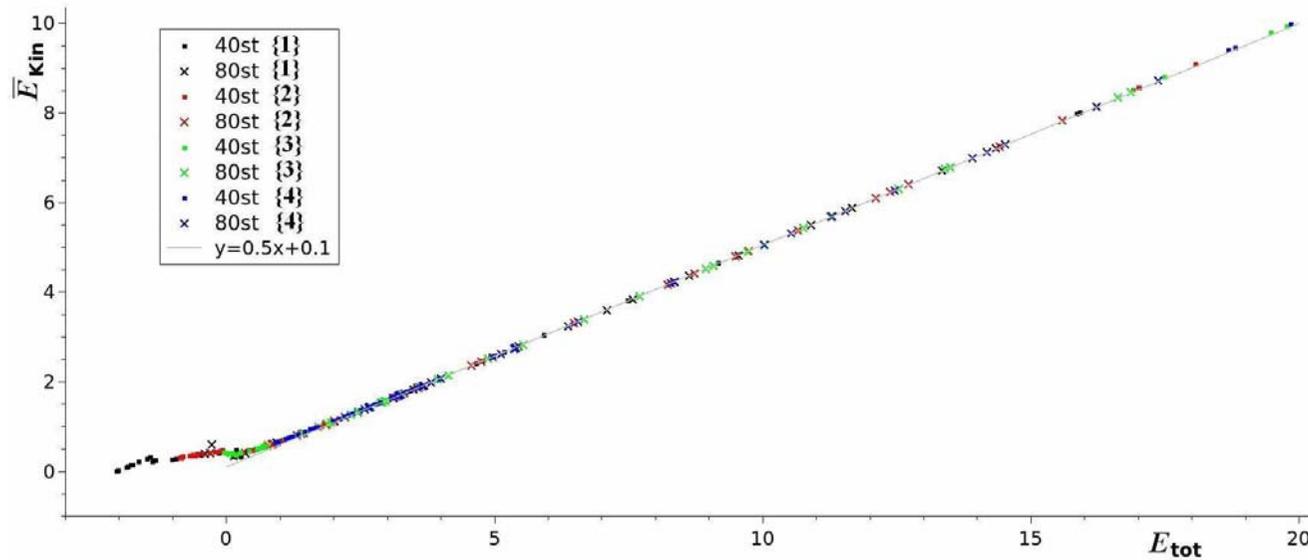
для поляронных начальных данных {1} $y = x - 0.9 \approx x - 2|\eta|$,

для {2} $b_n(0) = 1/\sqrt{N}$ $y = x - 0.3$,

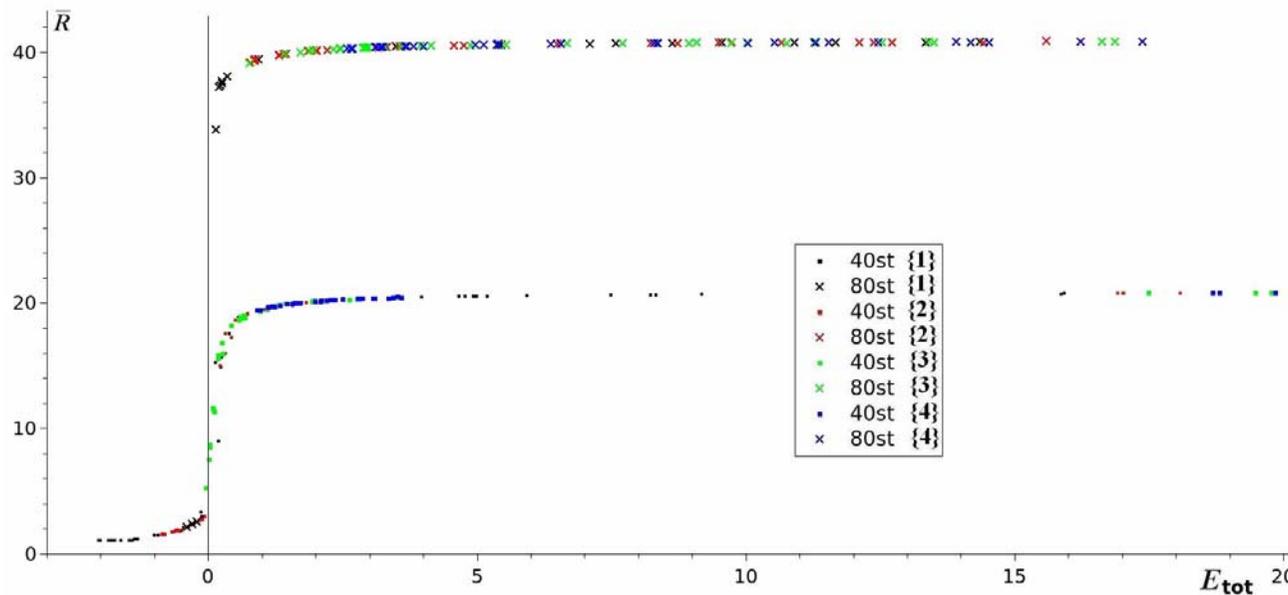
для {3} $b_{N/2}(0) = 1$ $y = x + 0.1$,

для {4} $b_n(0) = (-1)^n / \sqrt{N}$ $y = x + 0.6$.

Зависимости от полной энергии E_{tot}

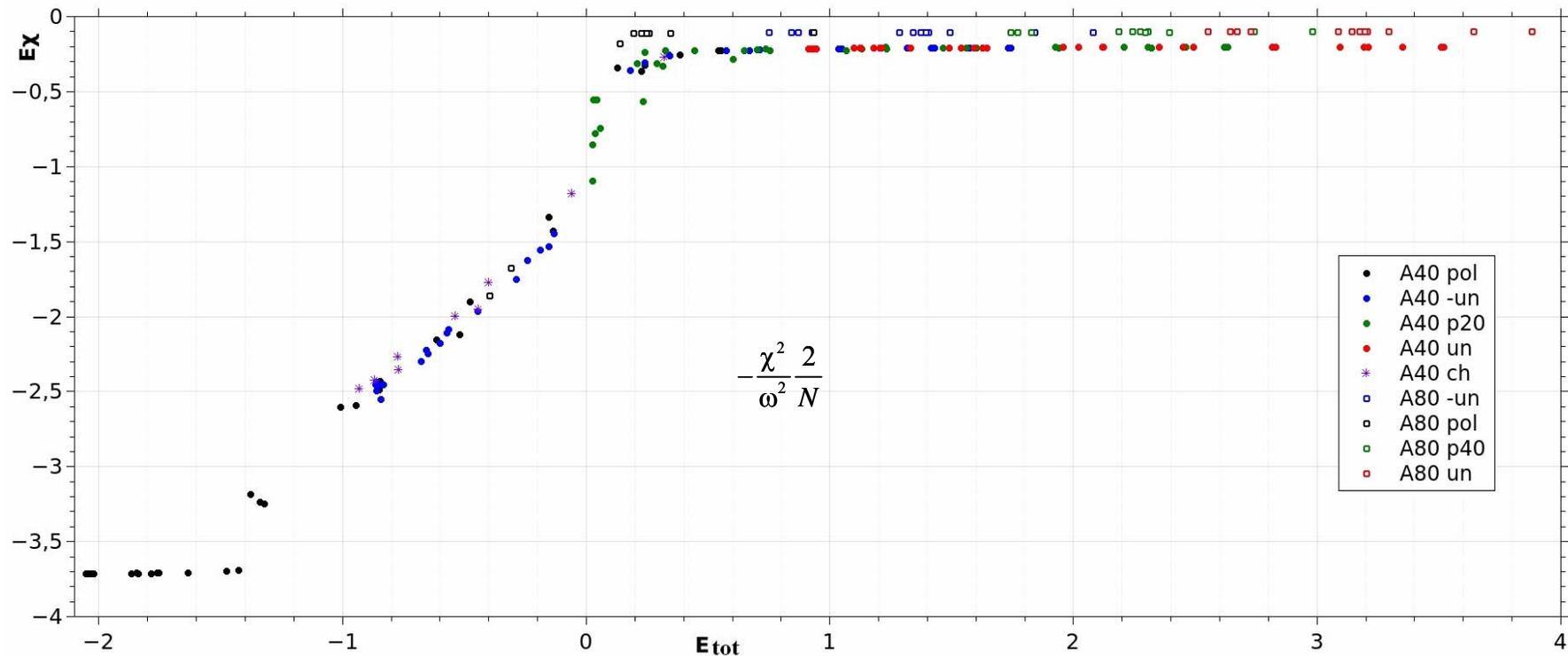


Зависимость
средней
кинетической
энергии



Зависимость
параметра
делокализации

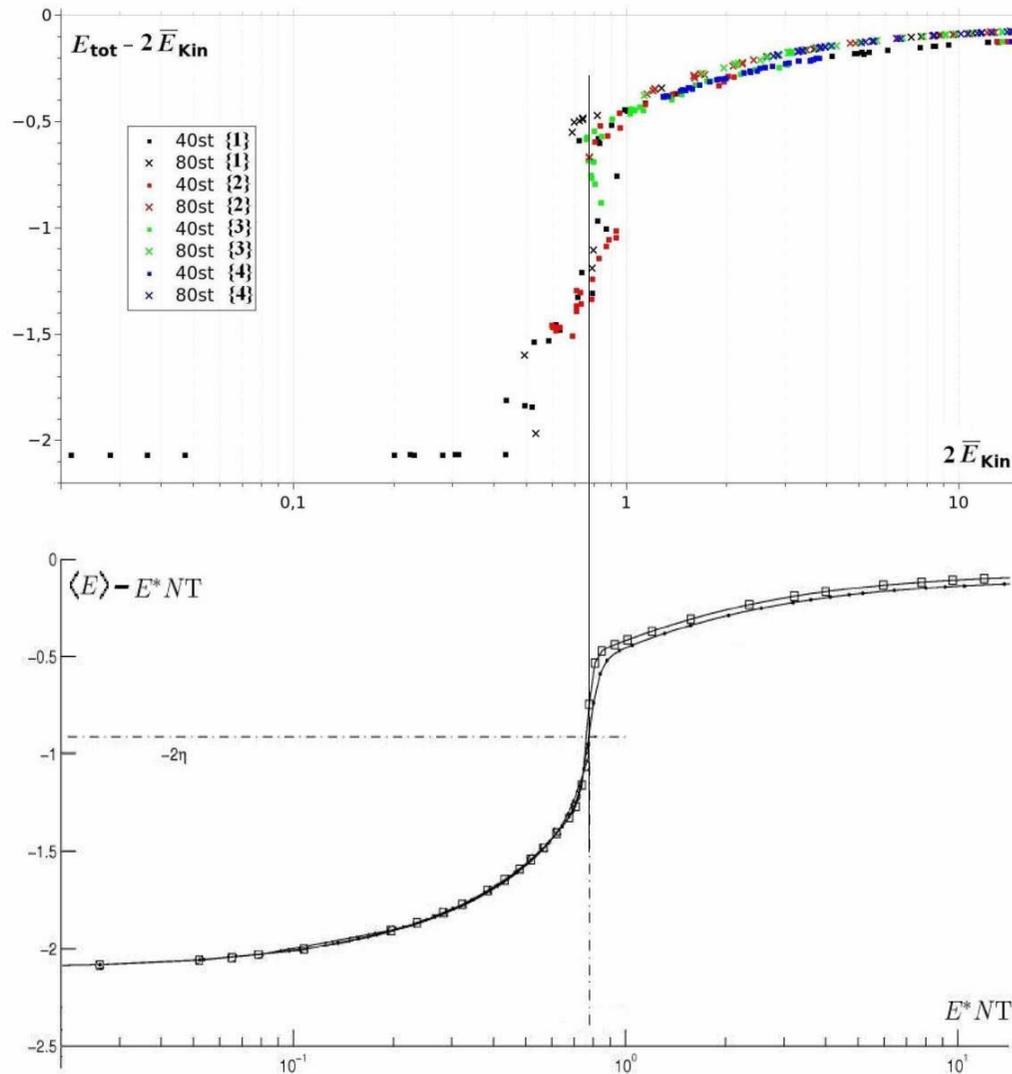
Зависимость энергии связи E_χ от E_{tot}



Для верхней ветви видно хорошее совпадение для гамильтоновой системы и системы с ланжевенским термостатом, для которой

$$\langle E_\chi \rangle \approx -\frac{\chi^2}{\omega^2} \frac{2}{N}$$

Сопоставление результатов

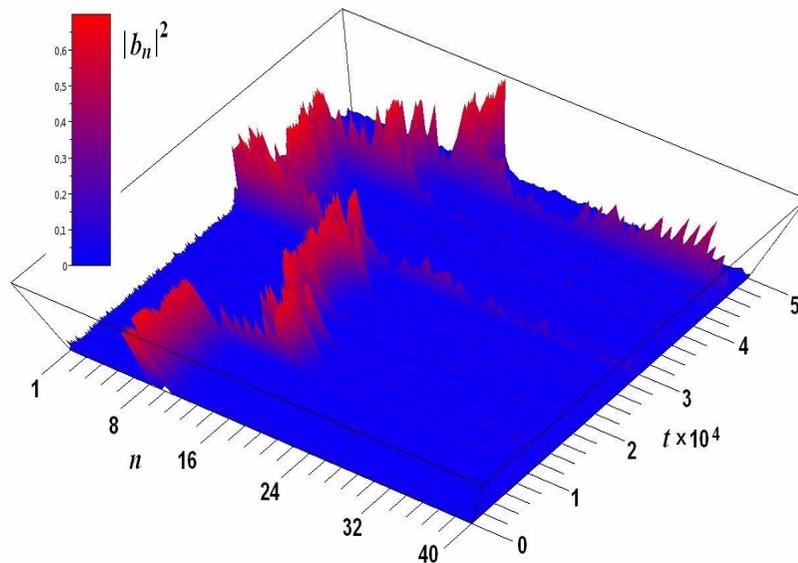


Зависимость
электронной части
энергии от тепловой
энергии цепочки для
гамильтоновой системы

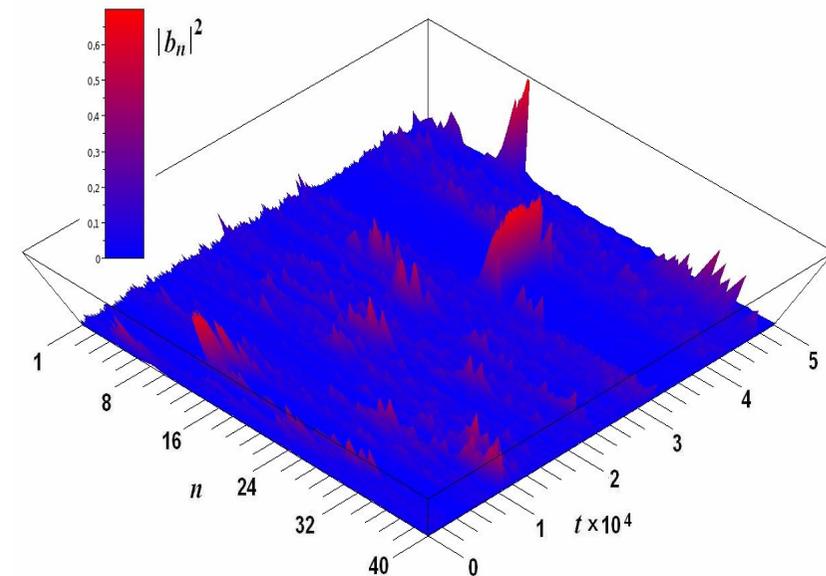
Зависимость
электронной части
энергии от тепловой
энергии цепочки для
системы с термостатом
Ланжевена

Динамика вероятности в отдельной реализации

Распределение вероятностей $|b_n|^2$ в 40-сайтовой цепочке после прихода системы к равновному состоянию на промежутке времени длиной $t = 50000$

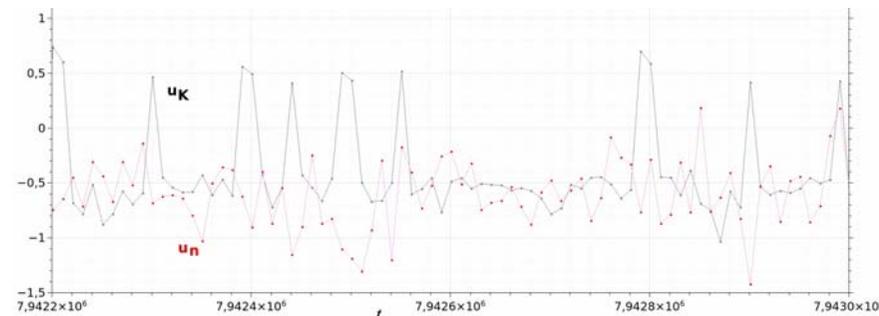
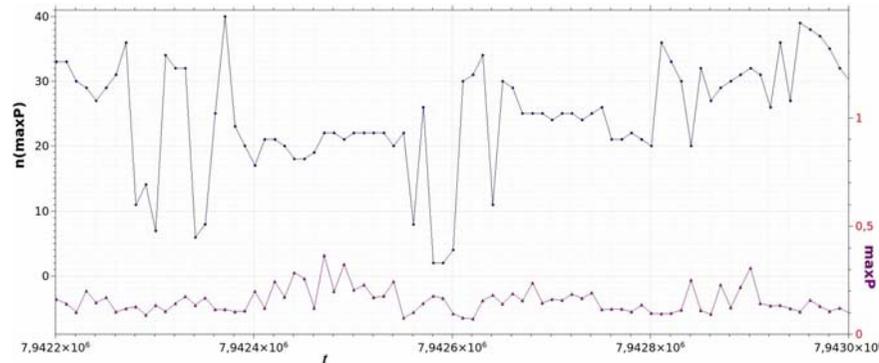


Гамильтонова система, $T_0=40$, $\langle T \rangle \approx 16$



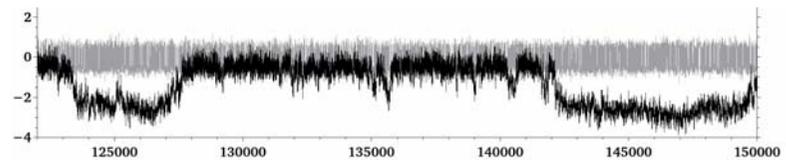
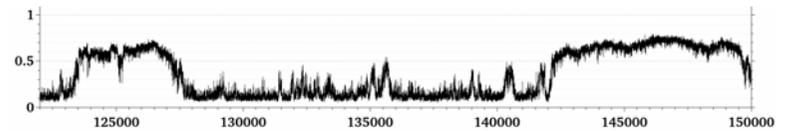
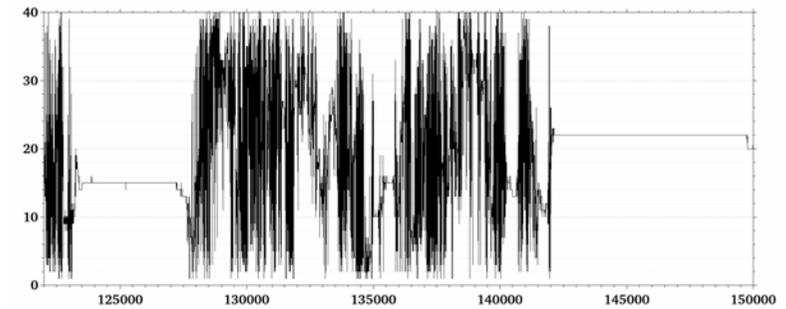
Термостат Ланжевена, $T=15$

Динамика максимума вероятности $\max_n |b_n|^2 = \max_n p_n$



$T_0=35, \langle T \rangle \approx 15$

Гамильтонова система. Есть последовательные переходы максимума вероятности с сайта на соседний сайт, хотя сам $\max P < 0.3$



A40, T=15

Система со случайной силой. Периоды неподвижного полярона с $\max P > 0.5$ сменяются интервалами «размазки по всей цепочке»

Результаты

Проведено численное исследование модели Холстейна для случаев «разогретая до T цепочка» + разное начальное распределение по сайтам вероятности нахождения заряда для гамильтоновой системы, проведено сравнение с термостатом Ланжевена.

Переход от режима полярона к делокализованному состоянию происходит вблизи $E_{\text{tot}} = 0$.

Для параметров полярона малого радиуса динамика максимума вероятности в отдельной реализации (есть переходы на соседние сайты) отличается от системы со случайной силой (смена интервалов «неподвижный полярон» - «размазка по всей цепочке»).

Выводы

Разрушение полярона в гамильтоновой системе происходит в том же диапазоне значений NT , что и для системы со случайной силой, однако T – не заданная начальными данными, а полученная после расчета, из средней кинетической энергии.

Из начальной температуры T_0 и начального распределения заряда можно оценить температуру цепочки на больших временах; так, для начального поляронного состояния цепочка «охладится» до $T \approx T_0 - 2|\eta|/N$.

Для больших E_{tot} (в области делокализованных состояний) средние результаты в системе со случайной силой и результаты для гамильтоновой системы близки, что не противоречит гипотезе эргодичности. С практической точки зрения, при биологически значимых температурах $T \approx 300$ К можно использовать любой вариант задания термостата.

Мы благодарны сотрудникам ЦКП ИПМ им. М.В.Келдыша РАН
(<http://ckp.kiam.ru>)
за предоставленные вычислительные мощности k-60

Спасибо за внимание!