



Contribution ID: 282

Type: not specified

Сравнение разных способов задания температуры в поляронной модели Холстейна

Tuesday, 4 July 2023 15:15 (15 minutes)

Математическое моделирование и вычислительный эксперимент служат важным инструментом в изучении процессов переноса заряда в биополимерах, таких как ДНК. Актуальность исследований переноса заряда в ДНК связана, в частности, с развитием наноэлектроники, которая является потенциальной заменой современной микроэлектроники, основанной на полупроводниковых технологиях. Задача моделирования переноса заряда в квази-одномерных биомолекулах с математической точки зрения сводится к следующему. Биополимер моделируется цепочкой сайтов (групп сильно связанных атомов), движение которых описывается классическими уравнениями движения. По цепочке сайтов распространяется квантовая частица (электрон или дырка), движение которой описывается уравнением Шредингера. Заряд может деформировать цепочку, и наоборот - смещения сайтов влияют на вероятности нахождения заряда.

При моделировании движения сайтов можно применять различные способы задания температуры (под температурой понимают среднюю кинетическую энергию атомов). Мы провели сравнение двух вариантов: термостат Ланжевена (к классическим уравнениям системы добавляются члены с трением и случайная сила со специальным распределением) и гамильтонова система, в которой температура задается только начальным распределением скоростей и смещений сайтов. Для заряда рассмотрены различные начальные состояния – полярон, равномерное распределение, возникновение на одном сайте.

По результатам моделирования, переход от режима полярона к делокализованному состоянию происходит в одинаковом диапазоне тепловой энергии, для обоих вариантов, однако здесь для гамильтоновой системы температура – не заданная начальными данными, а определенная после расчета из средней кинетической энергии. Для больших температур результаты, усредненные по набору траекторий, в системе со случайной силой и результаты, усредненные по времени, 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-100 и k-60

Summary

Primary author: FIALKO, Nadezhda (Institute of Mathematical Problems of Biology RAS - the Branch of Keldysh Institute of Applied Mathematics of Russian Academy of Sciences (IMPB RAS- Branch of KIAM RAS))

Co-authors: OLSHEVETS, Maxim (IMPB RAS- Branch of KIAM RAS); Prof. LAKHNO, Victor (IMPB RAS- Branch of KIAM RAS)

Presenter: FIALKO, Nadezhda (Institute of Mathematical Problems of Biology RAS - the Branch of Keldysh Institute of Applied Mathematics of Russian Academy of Sciences (IMPB RAS- Branch of KIAM RAS))

Session Classification: Distributed Computing and HPC Applications

Track Classification: Distributed Computing and HPC Applications