

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЦЕПОЧКАХ С ДИСПЕРСИЕЙ

Лахно В.Д., Фиалко Н.С.

Институт математических проблем биологии РАН, Россия, 142290 г.Пушино  
Московской обл., ул. Институтская д4, ИМПБ РАН. Тел. (4967)-732516,  
e-mail: fialka@impb.psn.ru

В настоящее время опубликовано множество работ, посвященных моделированию движения заряженной частицы в молекулярных цепочках различного типа (см., например, книги и обзоры [1,2] и ссылки в них). Интерес к этой проблеме связан, с одной стороны, с возросшими экспериментальными возможностями исследования процессов переноса в квазиодномерных молекулярных кристаллах, полимерах и биополимерах, а с другой стороны – с необычными проводящими свойствами таких систем.

Математическое моделирование процессов переноса заряда в биологических системах связано с использованием дискретных моделей, в которых рассматриваются пути переноса заряда в макромолекулах. В рассматриваемой модели движение заряда (электрона или дырки) описывается уравнением Шредингера, а колебания сайтов (групп атомов или молекул в квазиодномерной цепочке) – классическими уравнениями движения с дисперсией. Задача сводится к системе нелинейных связанных квантово-механических и классических ОДУ, которая интегрируется численно.

С помощью численных экспериментов показано, что в цепочке без дисперсии скорость движущейся уединенной волны (солитона) со временем уменьшается. Физический механизм убывания скорости обусловлен возбуждением незатухающих колебаний сайтов при движении солитона по цепочке (расчеты динамики переноса проводились в цепочках длиной до 5000 сайтов).

Численно показано, что при наличии дисперсии в цепочке существует почти стационарное решение, соответствующее движущемуся солитону. В этом случае колебания сайтов после прохождения по ним волны очень малы, на два порядка меньше, чем колебания самой волны. В случае без дисперсии это не так, амплитуда колебаний сайтов после прохождения солитона со временем остается велика.

Показано, что при наличии дисперсии в классической подсистеме стационарное движение солитона невозможно; с течением времени происходит остановка и система переходит в состояние стоячей волны.

### Литература

1. *Bernassoni J., Scheider T. (eds.)* Physics in One Dimension. – Springer-Verlag 1981. 368 pp.
2. *Starikov E.B., Tanaka S., Lewis J.P. (eds.)* Modern Methods for Theoretical Physical Chemistry of Biopolymers. – Elsevier 2006. 604 pp.