

# Дискретные бризеры в квазиодномерных наноструктурах

Закирьянов Ф.К.<sup>†</sup>, Фахретдинов М.И.<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>farni@rambler.ru; <sup>‡</sup>fakhretdinovmi@pochta.ru

Башкирский государственный университет, ул. Заки Валиди 32, 450074 Уфа

## Discrete breathers in quasi-one-dimensional nano-structures

F.K. Zakir'yanov, M.I. Fakhretdinov

Bashkortostan State University, Zaki Validi St. 32, 450074 Ufa

В данной работе рассматриваются модель ДНК Пейрара-Бишопа с нелинейным стэкинг взаимодействием. Найдено решение уравнений движения модели в виде дискретного бризера, описывающее растяжение водородной связи молекулы ДНК.

**Ключевые слова:** модель ДНК Пейрара-Бишопа, дискретный бризер.

The Peyrard-Bishop model of DNA with nonlinear stacking interactions is considered. The discrete breather solution of the model equation of motion describing the DNA H-bond stretching is reported.

**Keywords:** Peyrard-Bishop model of DNA, discrete breather.

Развитие новых квантовых приборов с размерами активных элементов порядка 10 нм и меньше является перспективным направлением развития современной наноэлектроники. Такие приборы будут востребованы в ближайшем будущем для создания систем обработки, хранения и отображения информации, источников СВЧ-излучения, оборудования электронного зондирования и наносенсоров. Для изготовления новых электронных компонентов предполагается использовать самые различные материалы. Это не только «традиционные» металлы и полупроводники, но и специфические наноматериалы, обладающие как свойствами металлов, так и полупроводников (аллотропные формы углерода, азота, оксида фосфора и т.п.). Большую популярность приобретают фуллерены, углеродные нанотрубки и графен, а также различные органические соединения, включая фрагменты ДНК. Для создания указанных выше электронных приборов, прежде всего, необходимо всестороннее изучение разнообразных свойств соответствующих наноматериалов и их взаимодействия с окружающей средой. Решение этой задачи требует как экспериментальных, так и теоретических подходов. Причём, оказывается, что математическое описание исследуемых объектов стало существенно более сложным. Связано это с тем, что наряду с традиционными факторами появились такие особенности как нелинейность,

сложная иерархия пространственно-временных масштабов, кооперативность процессов, наличие большого числа компонент среды. Вместе с тем, теоретический анализ математических моделей молекулярных наноструктур свидетельствует о наличии в их динамическом поведении новых интересных режимов, которые могут быть использованы в приложениях. Примером таких режимов могут служить солитоны, кинки и локализованные нелинейные моды – бризеры.

Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию стационарных дискретных бризеров, возникающих в квазиодномерных наноструктурах на примере модели ДНК Пейрара-Бишопа.

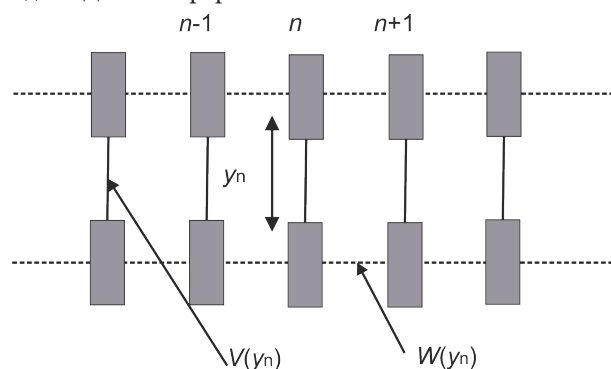


Рис. 1. Модель ДНК Пейрара-Бишопа

Дискретные бризеры (ДБ) – локализованные периодические колебания, возникающие в дискретных нелинейных системах, в частности в квазилинейных молекулярных цепочках [1,2]. Одним из интересных примеров такого рода объектов является модель ДНК Пейрара-Бишопа (ПБ-модель) [3]. В этой модели ДБ предшествуют возникновению «денатурационных глазков» (*denaturation bubbles*) – областей разделения комплементарных цепочек в процессе тепловой денатурации ДНК.

В данной работе используется точный метод получения ДБ ПБ-модели ДНК с нелинейным стэкинг взаимодействием [4] и исследуются динамические свойства бризеров в зависимости от параметров модели.

Модель Пейрара-Бишопа (ПБ) – простейшая модель денатурации молекулы ДНК, описывающая растяжение водородных связей, соединяющих пары оснований ДНК [3] (см. рис.1).

Здесь  $y_n(t)$  – растяжение  $n$ -й пары оснований ДНК массы  $m$ .  $V(y_n) = D[\exp(-ay_n) - 1]^2$  – потенциал Морзе, описывающий взаимодействие между двумя основаниями в паре,  $D$  – энергия диссоциации полинуклеотидных цепочек, а  $a$  – параметр, обратный длине (пространственный масштаб потенциала).  $W(y_n, y_{n-1}) = \frac{1}{2} K (y_n - y_{n-1})^2$  – гармонический потенциал, моделирующий стэкинг взаимодействие между парами оснований ДНК,  $K$  – константа взаимодействия между парами оснований вдоль цепи. Авторы получили зависимость среднего растяжения водородной связи пары оснований от температуры и объяснили начальный процесс тепловой денатурации локализацией энергии в цепочке ДНК с помощью нелинейных волн – бризеров.

В работе [4] был предложен улучшенный ангармонический потенциал стэкинг взаимодействия  $W(y_n, y_{n-1})$ , который учитывает экспериментальные данные по денатурации.

$$W(y_n, y_{n-1}) = \frac{1}{2} K (1 + \rho \exp[-\alpha(y_n + y_{n-1})]) (y_n - y_{n-1})^2,$$

где,  $\rho$  – параметр ангармонизма,  $\alpha$  – параметр, учитывающий уменьшение стэкинг взаимодействия вследствие перекрытия  $\pi$  – электронов оснований при их раскрытии в процессе денатурации.

Авторы работы [4] получили зависимость среднего растяжения водородной связи пары оснований от температуры, качественно и количественно совпадающую с известными экспериментальными данными.

Гамильтониан модели ПБД имеет вид:

$$H = \frac{1}{2} m \dot{y}_n^2 + W(y_n, y_{n-1}) + V(y_n) \quad (1)$$

Перейдем в (1) к безразмерным времени и смещению и энергии  $u = ay_n$ ,  $\tau = t \sqrt{\frac{da^2}{m}}$ ,  $H^* = \frac{H}{d}$ : и вернемся к «старым» переменным  $\tau \rightarrow t$ ,  $u \rightarrow y$ ,  $H^* \rightarrow H$ .

$$H = \frac{1}{2} \dot{y}_n^2 + [\exp(-y_n) - 1]^2 + \frac{1}{2} S (1 + \rho \exp[-\gamma(y_n + y_{n-1})]) (y_n - y_{n-1})^2, \quad (2)$$

где  $S = \frac{K}{da^2}$ ,  $\gamma = \frac{\alpha}{a}$  – безразмерные параметры.

Числовые параметры возьмем из работы [5]:  $D = 0.05254$  eV,  $a = 4$  Å<sup>-1</sup>,  $K = 0.01$  eV/Å<sup>2</sup>,  $\rho = 3$ ,  $\alpha = 0.8$  Å<sup>-1</sup>,  $m = 300$  а.е.м. При этом безразмерный параметр связи  $S = 0.0118957$  и параметр  $\gamma = 0.2$ .

Уравнения движения, соответствующие гамильтониану (2) имеют следующий вид:

$$\ddot{y}_n = S(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) + S\rho\{\exp[-\gamma(y_{n+1} + y_n)](y_{n+1} - y_n)\left[\frac{1}{2}\gamma(y_{n+1} - y_n) + 1\right] + \exp[-\gamma(y_n + y_{n-1})](y_n - y_{n-1})\left[\frac{1}{2}\gamma(y_n - y_{n-1}) - 1\right]\} + 2\exp(-y_n)[\exp(-y_n) - 1] \quad (3)$$

Закон дисперсии линейаризованного уравнения (3):

$$\omega_{ph} = \sqrt{2 + 4S(1 + \rho)\sin\left(\frac{q}{2}\right)^2} \quad (4)$$

где  $q$  – безразмерный волновой вектор  $0 < q < \pi/2$ ,  $\omega_{ph}$  – безразмерная частота. Соответственно частота линейного спектра меняется в пределах  $2^{1/2} < \omega_{ph} < [2 + 4S(1 + \rho)]^{1/2}$ , так как потенциал Морзе относится к потенциалам с мягким типом нелинейности, частота бризеров должна лежать в интервале  $2^{1/2}/2 < \omega_b < 2^{1/2}$ . Для того, чтобы частота бризера  $\omega_b$  и ее гармоники не попадали в зону фоновонного спектра, должно выполняться соотношение:  $0 < S < \frac{2\omega_b^2 - 1}{2\rho + 2}$ . Отсюда получим соотношение для максимального значения параметра связи осцилляторов  $S_{\max} = \frac{3}{2\rho + 2} = 0.375$ .

Рассмотрим бризер с частотой  $\omega_b = 1.2$ . Период бризера  $T_b = 2\pi/\omega_b$ . Для того чтобы найти решения уравнения (3) в виде дискретных бризеров, можно использовать разные методы. Мы будем использовать метод Ньютона, описанный в работе [6], с помощью которого можно найти бризерные решения с высокой точностью. Для анализа возможных решений бризеров найдем решение

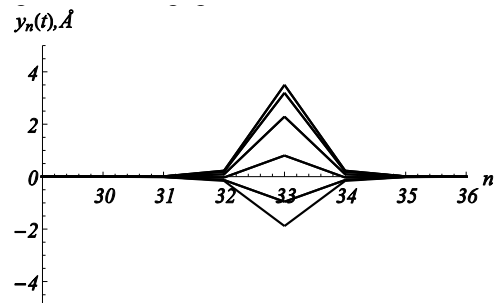


Рис. 2. Дискретный бризер в ПБД модели ДНК

(3) в антиконтинуальном пределе при  $S = 0$ . В этом пределе уравнение (3) переходит в систему несвязанных ангармонических осцилляторов, решая которую с соответствующими начальными условиями (5) и используя условие периодичности  $y_n(0) = y_n(T_b)$  можно получить начальную амплитуду решения  $A$  как нули функции  $y_n(0) - y_n(T_b)$ .

$$\begin{cases} \ddot{y}_n = 2 \exp(-y_n)(\exp(-y_n) - 1) \\ y_n(0) = A \\ \dot{y}_n(0) = 0 \end{cases} \quad (5)$$

Соответствующая частоте  $\omega_b = 1.2$  начальная амплитуда решения в антиконтинуальном пределе равна  $A = 0.752$ . Используя указанные ранее численные значения параметров модели ДНК, получим бризер с частотой, равной 6.23 THz. Рассматривалась система с 65 узлами и периодическими граничными условиями. На рис. 2 показана стробоскопическая картина движения бризера за один период для  $S = 0.0118957$ . Ширина бризера составляет примерно 4 узла. Амплитуда ДБ равна 3.5 Å. Полная энергия ДБ сохраняется и равна 0.01966 эВ.

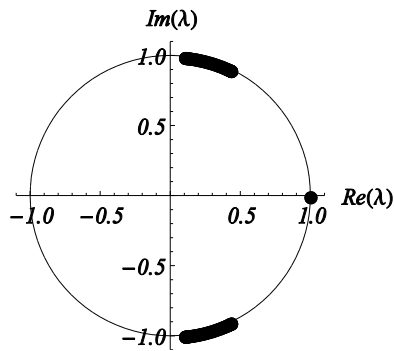


Рис. 3. Распределение мультипликаторов Флоке для решения в виде ДБ

Используя в качестве начальных условий полученное бризерное решение, система (3) численно интегрировалась на временах от 0 до  $2000 T_b$ . Решение оставалось локализованным, и для него строго выполнялось условие периодичности  $y_n(t) = y_n(t + T_b)$  на всем промежутке времени интегрирования.

В физических приложениях имеет смысл рассматривать только решения, обладающие устойчивостью по отношению к малым возмущениям. Стандартным методом исследования устойчивости дискретных бризеров является метод Флоке [1,6]. Собственные значения  $\lambda$  ли-

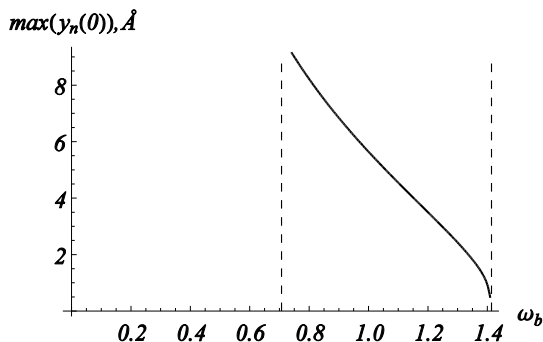


Рис. 4. Зависимость амплитуды ДБ от частоты

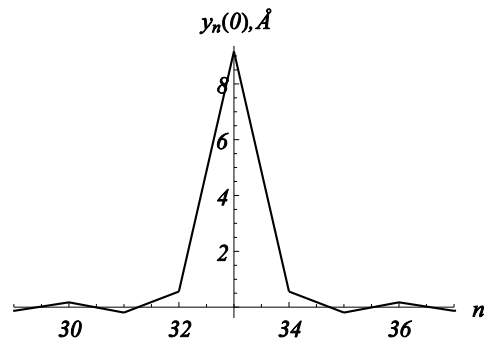


Рис. 5. ДБ соответствующей частоте  $\omega_b = 0.74$

неаризованной задачи (3) для решения в виде ДБ, лежат на единичной окружности (см. рис. 3), что означает, что данное решение обладает устойчивостью по отношению к малым возмущениям.

Рассмотрим изменение параметров бризера при изменении его частоты  $\omega_b$ . Для расчета мы зафиксировали параметр  $S = 0.0118957$ , взяли полученное решение для ДБ с частотой  $\omega_b = 1.2$  и медленно изменяя параметр  $\omega_b$  методом Ньютона находили решения в виде ДБ для других частот  $\omega_b$ .

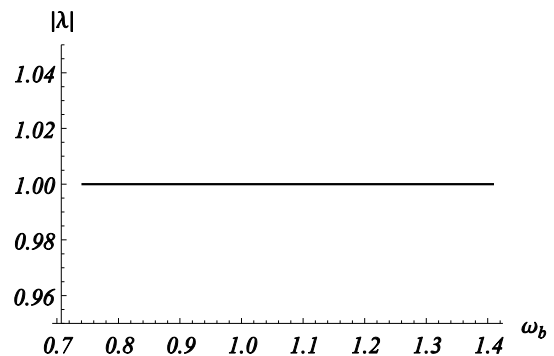


Рис. 6. Зависимость модуля мультипликаторов Флоке от частоты ДБ

Как уже говорилось, закон дисперсии линеаризованного уравнения (3) показывает, что частота бризера может изменяться в пределах  $2^{1/2}/2 < \omega_b < 2^{1/2}$ . В размерных переменных это составляет значение от 3.84 THz до 7.33 THz. Действительно численный расчет показал, что продолжение по параметру  $\omega_b$  возможно только в этих пределах. На рис. 4 показана зависимость амплитуды ДБ от частоты  $\omega_b$  для  $S = 0.0118957$ . Пунктирными линиями на рисунке показаны “теоретические” границы частоты  $\omega_b$ , полученные при анализе закон дисперсии изучаемого уравнения.

С увеличением частоты амплитуда бризера уменьшается от 9.16 Å до 0.23 Å, что характерно для нелинейности мягкого типа [2]. Наибольшая амплитуда бризера достигается при частоте  $\omega_b = 0.74$ . ДБ соответствующий частоте  $\omega_b = 0.74$  показан на рис. 5.

Все ДБ полученные при  $S = 0.0118957$  являются устойчивыми. На рис. 6. показана зависимость модуля мультипликаторов Флоке от частоты ДБ.

С увеличением частоты  $\omega_b$  ширина ДБ увеличивается и при приближении  $\omega_b$  к значению  $2^{1/2}$  ДБ расплывается см. рис. 7.

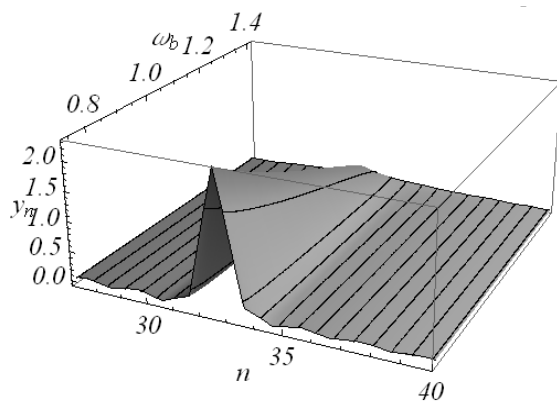


Рис. 7. Изменение ДБ при изменении частоты

Таким образом, в данной работе была рассмотрена модель ПБ, с нелинейным стэкинг взаимодействием, описывающая динамические свойства молекулы ДНК через растяжения её водородных связей. Показано, что для известных из литературы значений параметров молекулы ДНК в данной модели возможны решения в виде дискретных бризеров. Построены решения в виде дискретных бризеров для разных значений частот  $\omega_b$ , что при подстановке значений параметров модели [5] соответствует частотам от 3.84 THz до 7.33 THz. С увеличением частоты амплитуда ДБ уменьшается, а шири-

на увеличивается. ДБ имеют ширину примерно 4 пары оснований ДНК и амплитуду порядка 3-7 Å, т.е. являются сугубо дискретными объектами большой амплитуды, которые нельзя рассматривать в рамках континуального приближения.

Методом Флоке исследована устойчивость полученных решений. Найденные в виде ДБ решения устойчивы по отношению к малым возмущениям ДБ можно интерпретировать как экспериментально наблюдаемые раскрытия пар оснований в двойной спирали ДНК в начальных стадиях процесса денатурации [3,4].

## Литература

1. S. Flach, A.V. Gorbach. Phys. Rep. **1**, 467 (2008).
2. S.V. Dmitriev. Letters on Materials **1**(2) 78 (2011), (in Russian) [Дмитриев С.В. Письма о материалах **1**(2), 78 (2011)].
3. M. Peyrard, A.R. Bishop. Phys. Rev. Lett. **62**(23) 2755 (1989).
4. T. Dauxois, M. Peyrard and A.R. Bishop. Phys. Rev. E **47**(1) R44 (1993).
5. M. Peyrard, S.C. Lypez, G. James. Nonlinearity **21**, 91 (2008).
6. J.L. Marin, S. Aubry. Nonlinearity **9**, 1501 (1996).