

О ДИНАМИКЕ ПОЛЯРОНА В КЛАССИЧЕСКОЙ ЦЕПОЧКЕ С КОНЕЧНОЙ ТЕМПЕРАТУРОЙ

*В. Д. Лакно**, *Н. С. Фиалко***

*Институт математических проблем биологии Российской академии наук
142290, Пущино, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 2 июля 2014 г.

В современной литературе поляронные состояния в классических молекулярных цепочках в подавляющем большинстве рассчитываются для нулевой температуры. При этом считается, что их свойства мало меняются, если температура отлична от нуля, но много меньше характерной энергии, равной глубине поляронного уровня. Нами с помощью численного эксперимента показано, что «температурное» разрушение полярона зависит от длины цепочки. Чем длиннее цепочка, тем ниже критическая температура, выше которой заряд находится в «делокализованном» состоянии, и наоборот — чем короче цепочка, тем выше температура «развала» полярона. Результаты вычислительных экспериментов приводят к предположению, что в неограниченно длинной цепочке поляронные состояния разрушаются при сколь угодно мало отличающейся от нуля температуре.

DOI: 10.7868/S0044451015010125

1. ВВЕДЕНИЕ

Вопрос о возможности переноса энергии и заряда локализованными возбуждениями — солитонами или поляронами — в биологических молекулах был впервые поставлен Давыдовым [1–4], и вплоть до настоящего времени полная ясность в его решении отсутствует. В работе [5] посредством прямого численного эксперимента было показано, что давидовский солитон при физиологических температурах быстро разрушается и перенос им энергии невозможен. Самым удивительным оказалось то, что при энергии связи солитона около 300 К его разрушение происходит при очень низкой температуре, меньшей 10 К. Последующие многочисленные вычислительные эксперименты и аналитические оценки разных авторов [6–15] подтвердили вывод, что при физиологических температурах в биомакромолекулах поляроны разрушаются. В работах [1–5] рассматривался случай взаимодействия с акустическими фононами, и могло бы показаться, что можно учесть взаимодействия с другими степенями свободы и это увеличит энергию связи солитона, делая его стабиль-

ным при комнатных температурах. Однако увеличение энергии связи солитона приводит к его сильной локализации и, как следствие, к практически полной невозможности перемещений по молекулярной цепочке [16–19].

Усложнение модели — введение разного типа нелинейных взаимодействий и ангармонических потенциалов [15, 20–22] в молекулярной цепочке — «улучшает» ситуацию, поляроны существуют при более высоких температурах, однако эти исследования проводились для достаточно коротких цепочек и при малых временах счета, оставляя, тем самым, открытым вопрос о температурной стабильности поляронных состояний.

В данной работе с использованием прямого численного эксперимента мы, как ранее [5, 14], исследуем вопрос о возможности существования полярона (солитона) в молекулярной цепочке при конечной температуре. В качестве модели выбран полярон Холстейна в связи с актуальностью этой модели для объяснения переноса заряда в ДНК [23–27], см. также работы [18, 28–30]. Моделирование выполнено для величин параметров, приведенных Холстейном для полярона малого радиуса [31]. Это позволяет сравнить результаты полуклассических расчетов и результаты, полученные на основе точного квантовомеханического описания [31, 32].

*E-mail: lak@impb.psn.ru

**E-mail: fialka@impb.psn.ru

2. МОДЕЛЬ

Модель основана на гамильтониане Холстейна для дискретной цепочки сайтов [31, 32]. В полуклассическом приближении, выбирая волновую функцию Ψ в виде

$$\Psi = \sum_{n=1}^N b_n |n\rangle,$$

где b_n — амплитуда вероятности нахождения заряда (электрона или дырки) на n -м сайте ($n = 1, \dots, N$, N — длина цепочки), получим усредненный гамильтониан

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle &= \sum_{m,n} \nu_{nm} b_m b_n^* + \frac{1}{2} \sum_n M \dot{u}_n^2 + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_n K \tilde{u}_n^2 + \sum_n \alpha' \tilde{u}_n b_n b_n^*. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь ν_{mn} ($m \neq n$) — матричные элементы перехода электрона между m -м и n -м сайтами (зависящие от интегралов перекрытия), ν_{nn} — энергия заряда на n -м сайте. Мы используем приближение ближайших соседей, т. е. $\nu_{mn} = 0$, если $m \neq n \pm 1$; считаем, что внутрисайтовые колебания \tilde{u}_n относительно центра масс малы и могут считаться гармоническими; полагаем линейной зависимость энергии от смещений сайтов \tilde{u}_n из их равновесных положений, α' — константа связи квантовой и классической подсистем, M — эффективная масса сайта, K — упругая постоянная. Уравнения движения для гамильтониана (1) имеют вид

$$i\hbar \frac{db_n}{dt} = \nu_{n,n-1} b_{n-1} + \nu_{n,n} b_n + \nu_{n,n+1} b_{n+1} + \alpha' \tilde{u}_n b_n, \quad (2)$$

$$M \frac{d^2 \tilde{u}_n}{dt^2} = -K \tilde{u}_n - \alpha' |b_n|^2 - \tilde{\gamma} \frac{d\tilde{u}_n}{dt} + \tilde{A}_n(\tilde{t}). \quad (3)$$

В подсистему (3) для моделирования термостата добавлены член с трением ($\tilde{\gamma}$ — коэффициент трения) и случайная сила $\tilde{A}_n(\tilde{t})$ со свойствами

$$\langle \tilde{A}_n(\tilde{t}) \rangle = 0, \quad \langle \tilde{A}_n(\tilde{t}) \tilde{A}_m(\tilde{t} + \tilde{s}) \rangle = 2k_B \tilde{T} \tilde{\gamma}_n \delta_{nm} \delta(\tilde{s}),$$

\tilde{T} — температура [К]. Такой способ имитации температуры окружающей среды с помощью уравнений Ланжевена (3) давно известен [5, 33, 34].

При $\tilde{T} = 0$ стационарным состоянием системы с наиминимальной энергией E_{pol} будет полярон [32], когда заряд локализован на нескольких сайтах. Величина E_{pol} зависит от параметров модели, но не зависит от

длины классической цепочки, если, конечно, цепочка достаточно длинная и полярон не упирается в ее края.

Для приведения системы (2), (3) к безразмерному виду выберем характерное время τ , $\tilde{t} = \tau t$, и характерный масштаб колебаний U^* , $\tilde{u}_n = U^* u_n$. Безразмерные уравнения движения для однородной цепочки имеют вид

$$i \frac{db_n}{dt} = \eta (b_{n-1} + b_{n+1}) + \chi u_n b_n, \quad (4)$$

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = -\omega^2 u_n - \chi |b_n|^2 - \gamma \frac{du_n}{dt} + \xi Z_n(t). \quad (5)$$

Связь размерных параметров с безразмерными следующая. Матричные элементы $\eta = \nu_{n,n\pm 1} \tau / \hbar$, частоты колебаний сайтов $\omega = \tau \sqrt{K/M}$. Характерная величина колебаний U^* выбрана так, чтобы множитель в уравнениях (4) и (5) у членов, учитывающих взаимодействие квантовой и классической частей системы, был одинаковым, константа связи $\chi = \alpha' \sqrt{\tau^3 / \hbar M}$. Коэффициент трения $\gamma = \tilde{\gamma} \tau / M$, $Z_n(t)$ — нормальная случайная величина с единичным распределением

$$\begin{aligned} \langle Z_n(t) \rangle &= 0, \quad \langle Z_n(t) Z_n(t + t') \rangle = \delta(t'), \\ \xi &= \frac{\sqrt{2k_B \tilde{T} \tilde{\gamma} \tau^3}}{MU^*} = \sqrt{\frac{2k_B T^* \tau}{\hbar}} \sqrt{\gamma \tilde{T}}, \end{aligned} \quad (6)$$

где T^* — характерная температура (мы приняли $T^* = 1$ К), безразмерная температура $\mathcal{T} = \tilde{T} / T^*$.

3. ПАРАМЕТР ДЕЛОКАЛИЗАЦИИ

Моделирование сводится к численному интегрированию системы ОДУ (4), (5), описывающей движение квантовой частицы (электрона или дырки) по цепочке классических сайтов. Расчеты проводятся по большому числу реализаций (динамики распространения заряда из разных начальных условий и с разными значениями случайной силы) с дальнейшим получением «средних по реализациям» временных зависимостей. Нас интересует параметр делокализации

$$\langle R \rangle = \left\langle \frac{1}{\sum |b_n|^4} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{\sum p_n^2} \right\rangle \quad (7)$$

(здесь через $p_n(t) = |b_n|^2$ обозначена вероятность нахождения заряда на n -м сайте) после выхода системы на термодинамическое равновесие, и его зависимость от температуры, $\langle R(\mathcal{T}) \rangle$.

Очевидно, что для одной реализации, если заряд локализован на n -м сайте ($p_n(t) \approx 1$), то $R \approx 1$. Если

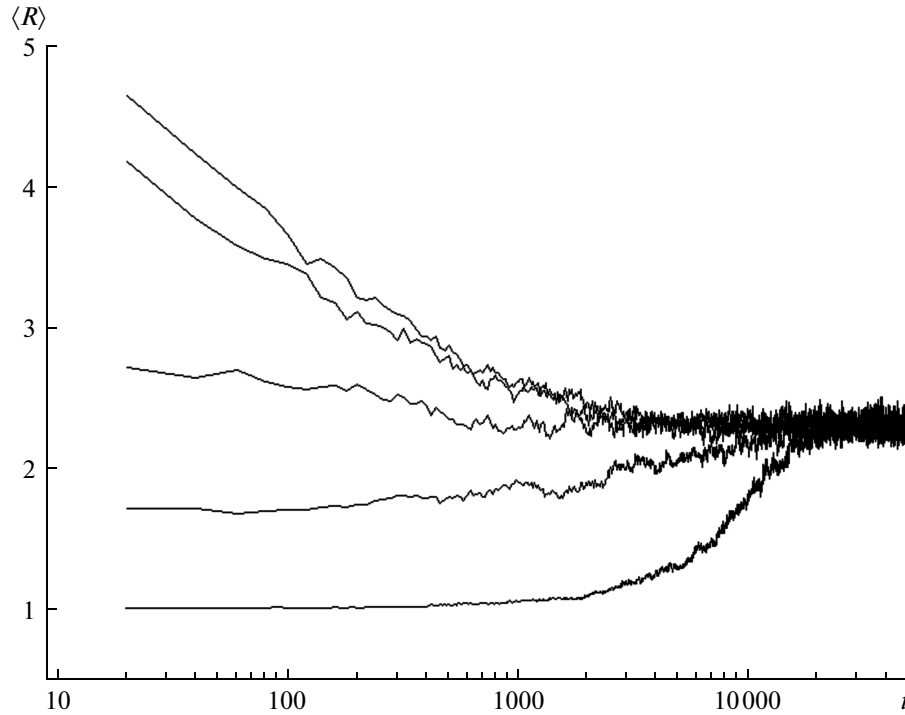


Рис. 1. Графики временной зависимости коэффициента делокализации $\langle R(t) \rangle$ (усреднение наборов по 100 вариантов) для 9-сайтовой цепочки при $T = 200$. Нижний график — расчет из начальных условий «полярон с температурой» (поляронное распределение для вероятностей, что соответствует $\langle R \rangle \approx 1.02$, «поляронное + температурное» смещения сайтов и «температурное» распределение скоростей сайтов). Остальные графики — расчет из равновесных начальных данных по скоростям и смещениям сайтов для разных начальных распределений вероятности: верхняя линия — из равномерного ($\langle R(t=0) \rangle = 9$, $\langle R(t=20) \rangle \approx 4.7$), ниже — из «прямоугольного» на четырех сайтах в середине цепочки, $b_3(t=0) = b_4(t=0) = b_5(t=0) = b_6(t=0) = 0.25$ ($\langle R(t=0) \rangle = 4$, $\langle R(t=20) \rangle \approx 4.2$), затем из $|b_5(t=0)| = 1$ ($\langle R(t=0) \rangle = 1$, $\langle R(t=20) \rangle \approx 2.8$), и ниже из $|b_1(t=0)| = 1$ ($\langle R(t=0) \rangle = 1$, $\langle R(t=20) \rangle \approx 1.8$). Можно утверждать, что система вышла на термодинамическое равновесие при $t > 25000$, после этого момента $\langle R \rangle \approx 2.3$

заряд в какой-то момент t равномерно распределен по N -сайтовой цепочке ($p_n(t) = 1/N$), то $R(t) = N$.

Для высокой температуры, при которой смещения сайтов, вызванные нахождением заряда, много меньше, чем вызванные температурными флуктуациями, надо учесть, что половина смещений имеет знак «+», вторая половина — знак «-». Сделаем грубую оценку: в отдельной реализации на сайтах с положительными смещениями заряда нет (это следует из стационарного уравнения (5) $0 = -\omega^2 u_n - \chi |b_n|^2$), а на остальных он распределен равномерно, т.е. $p_n = 2/N$. Тогда

$$R = \frac{1}{\sum p_n^2} = \frac{N}{2},$$

и усредненный по реализациям параметр делокализации равен $\langle R \rangle = N/2$. По результатам численного моделирования при высоких температурах резуль-

тат такой же, $\langle R \rangle \approx N/2$. При этом расчет из средних вероятностей дает $1/\langle p_n(t)^2 \rangle \approx N$, т.е. средняя вероятность нахождения заряда одинакова по всем сайтам.

Нас интересует, как ведет себя при разной температуре параметр делокализации $\langle R(T) \rangle$.

4. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Величины параметров модели, соответствующие полярону малого радиуса (при $T = 0$ заряд локализован на одном сайте с вероятностью $p \approx 0.99$, т.е. $R \approx 1.02$), мы взяли из работы [31]: $\nu = \hbar\omega = 0.04$ эВ, $\alpha'/2M\hbar\omega^3 = 10$. Характерное время выбрали $\tau = 10^{-14}$ с, характерную температуру $T^* = 1$ К. Безразмерные коэффициенты системы (4), (5): частоты классических сайтов и матричные эле-

менты одинаковы, $\eta = \omega = 0.608$, $\chi = 2.12$. Близкие параметры квантовой (4) и классической (5) подсистем позволяют уменьшить расчетное время до выхода на термодинамическое равновесие.

Расчеты отдельных реализаций для получения $\langle R(T) \rangle$ выполнялись 2o2s1g-методом [35]. Для проверки часть расчетов была выполнена, кроме этого метода, смешанным алгоритмом [36]; средние результаты одинаковы.

При численном интегрировании начальные классические смещения и скорости сайтов в реализациях в начальный момент задаются из равновесного распределения при заданной температуре. Для квантовой подсистемы задаются разные варианты распределения заряда: например, на краях цепочки с вероятностью $p_1 = p_N = 0.5$ или на одном сайте в центре цепочки с вероятностью $p_{[N/2]} = 1$. Либо задается «поляронное распределение»: в квантовой подсистеме (4) амплитуды вероятностей $b_n(t = 0)$ соответствуют полярону — состоянию с наименьшей энергией, а в классической подсистеме (5) поляронные смещения суммируются со случайными смещениями, вызванными температурой, при этом скорости сайтов задаются из равновесного распределения.

Для каждого варианта рассчитываются средние временные зависимости (по наборам от 100 до 500 реализаций). После выхода на термодинамическое равновесие средние величины $\langle R(T) \rangle$ должны быть одинаковыми.

На рис. 1 приведены результаты расчетов для времени выхода на состояние термодинамического равновесия при $T = 200$ для наборов с разными начальными данными в квантовой подсистеме (и, соответственно, с различной начальной энергией системы). Показана динамика $\langle R(t) \rangle$, рассчитанная из состояния с наименьшей энергией E_{pol} полярона, из равномерного начального распределения заряда по всем сайтам (которое без учета температуры соответствует состоянию с наибольшей энергией E_{max}), при локализации в начальный момент заряда на одном сайте и на четырех сайтах. Видно, что медленнее всего разрушается поляронное состояние. Отметим, что хотя характерные времена безразмерной системы (4), (5) порядка единицы, время интегрирования траектории до выхода на термодинамическое равновесие довольно велико и увеличивается при понижении температуры. Так, для этой же цепочки девяти сайтов при температуре $T = 150$ время выхода на термодинамическое равновесие из «крайних» начальных состояний — поляронного (E_{pol}) и равномерного (E_{max}) — почти в четыре раза больше, $t > 90000$.

Заметим, что при выбранных нами значениях параметров при $T = 0$ полярон локализован на одном сайте с вероятностью $p_{[N/2]} \approx 0.99$ и на двух соседних сайтах с вероятностью $p_{[N/2] \pm 1} \approx 0.0026$, т. е. цепочка длиной в девять сайтов уже может считаться бесконечной.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для цепочки длины N температурная зависимость коэффициента делокализации $\langle R(T) \rangle$ имеет S-образную форму. При близких к нулю температурах имеем $\langle R(T) \rangle \approx 1$, затем медленный рост с повышением температуры, и потом, в узком температурном диапазоне, резкий скачок и опять медленный рост до $\langle R(T) \rangle \approx N/2$ (рис. 2).

Оказалось, что для цепочек разной длины (хотя все они достаточно велики, чтобы при $T = 0$ считаться «бесконечными» для локализованного в центре полярона) при одинаковой температуре величина $\langle R(T) \rangle$ может сильно различаться. Графики рассчитанных величин $\langle R(T) \rangle$ для цепочек разной длины приведены на рис. 2. Например, при $T = 50$ для цепочек длиной $N \leq 35$ сайтов значение $\langle R(T = 50) \rangle$ не больше 2, для цепочки $N = 40$ сайтов $\langle R(50) \rangle \approx 10$, и для цепочки длиной $N = 49$ сайтов $\langle R(50) \rangle \approx 23 \approx N/2$ (рис. 2). Таким образом, в «коротких» цепочках поляроны еще есть, а в «длинных» при этой же температуре появляется делокализованное состояние.

По результатам расчетов величина температуры разрушения полярона T_c зависит от длины цепочки: чем больше N , тем ниже температура, при которой $\langle R(T) \rangle \approx N/2$ и заряд в среднем равномерно распределен по всей цепочке. Следовательно, какую бы малую конечную температуру мы не взяли, можно подобрать такую длину N , что в более длинных цепочках полярон при этой температуре будет разрушаться.

Полученные результаты показывают, что критическим параметром, определяющим разрушение полярона, является не температура, а энергия, запасенная в решеточной подсистеме¹⁾. Это следует из рис. 3, на котором приведены перемасштабированные зависимости $\langle R \rangle / (N/2)$ от энергии цепочки $Nk_B \tilde{T}$. На рис. 3 видно, что с ростом N графики сближаются. «Полуделокализованное» состояние $\langle R \rangle / (N/2) = 0.5$ соответствует примерно $0.4|E_{pol}|$. Можно сделать следующую оценку: при выбранных

¹⁾ Авторы признательны за это замечание рецензенту.

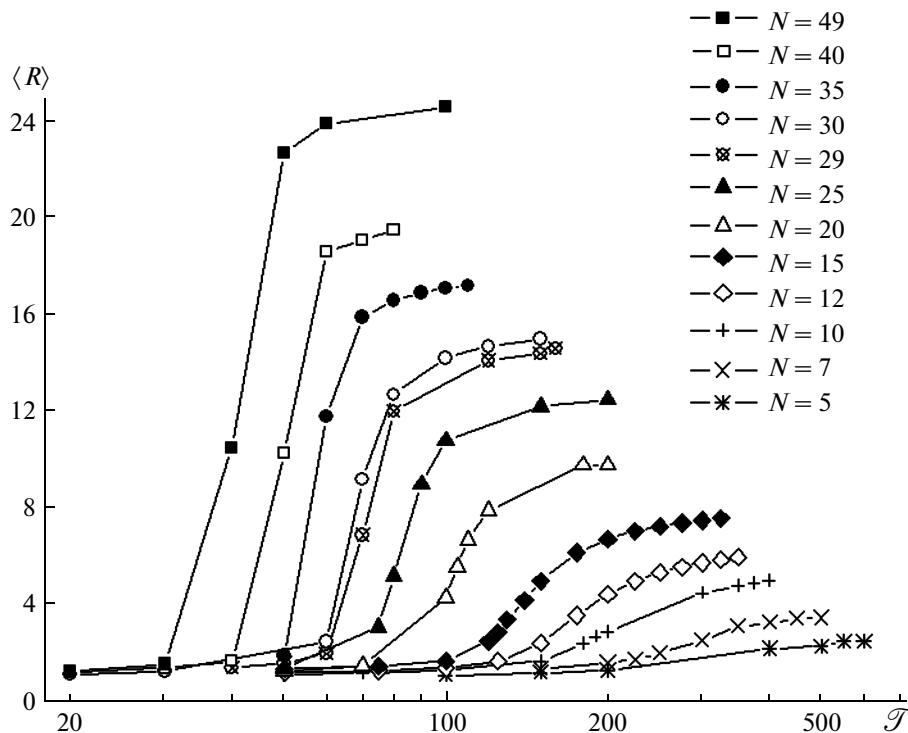


Рис. 2. Графики термодинамических значений $\langle R(T) \rangle$ для цепочек разной длины N . По оси абсцисс безразмерная температура $\mathcal{T} = \tilde{T}/T^*$, $T^* = 1$ К

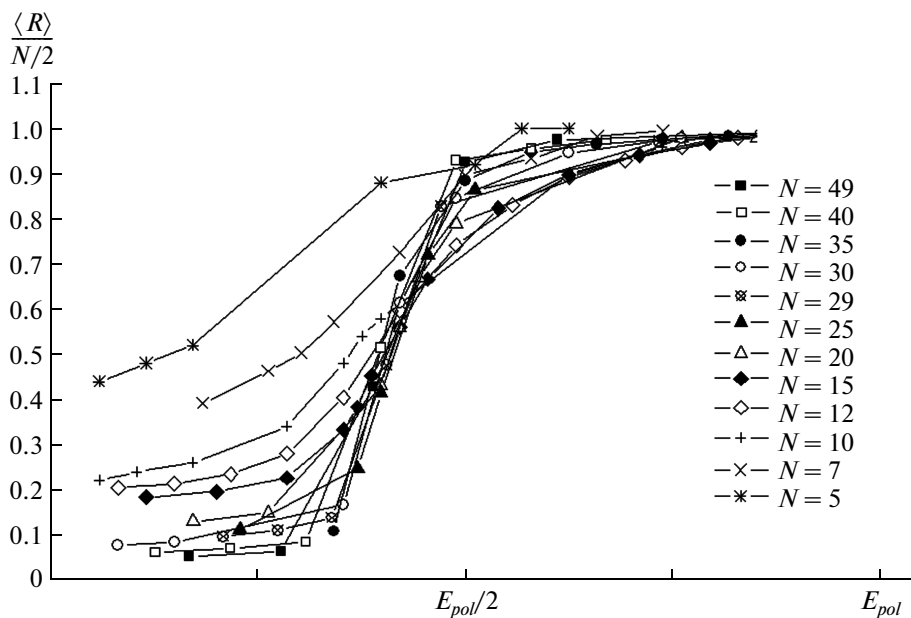


Рис. 3. Перемасштабированные графики $\langle R(T) \rangle$ (обозначения кривых совпадают с рис. 2). По оси абсцисс отложена энергия классической цепочки без привнесенного заряда, по оси ординат — перемасштабированный параметр делокализации $\langle R(T) \rangle / (N/2)$

параметрах разрушение начинается при энергии цепочки $E > |E_{pol}|/3$, и для $E > |E_{pol}|/2$ заряд находится в делокализованном состоянии.

Таким образом, согласно рис. 3, критическая температура развала полярона \tilde{T}_c определяется из соотношения

$$N_c k_B \tilde{T}_c \approx |E_{pol}|, \quad (8)$$

т. е. когда полная энергия цепочки становится по порядку величины равной энергии полярона. Можно дать качественное объяснение этого явления. Как показано в работе [37], при низкой температуре число делокализованных состояний электрона в цепочке при $N \gg 1$ намного превышает число его локализованных состояний. Тогда при полной энергии цепочки, превышающей полную энергию полярона $|E_{pol}|$, электрон, как можно предположить, будет преимущественно находиться в делокализованном состоянии, что соответствует разрушению поляронного состояния.

Для «достаточно длинных» цепочек (как видно из рис. 3, $N = 5$ или $N = 7$ сайтов — еще не длинная цепочка; при выбранных параметрах лучше взять $N > 12$) в безразмерных переменных величина $N\mathcal{T} = E_c$ определяет область стабильности поляронных состояний. Другими словами, плоскость (N, \mathcal{T}) делится гиперболой $N_c \mathcal{T}_c = E_c$ на две области — выше гиперболы поляроны в цепочке разрушаются, а ниже поляронные состояния стабильны.

В области стабильности исходно введенный в цепочку полярон со временем изменит свою форму (максимум вероятности уменьшается с увеличением температуры). Как качественную картину процесса перехода к релаксированному состоянию можно использовать самую нижнюю кривую на рис. 1, для которой время выхода на термодинамическое равновесие составляет $t \approx 25000$; при этом $\langle R(t) \rangle$ меняется от значения $\langle R(0) \rangle \approx 1.02$ к новой величине $\langle R \rangle \approx 2.3$. Отметим, что в этой области $N < N_c$, $\mathcal{T} < \mathcal{T}_c$ время релаксации зависит не только от температуры, но и от длины цепочки.

В области $N > N_c$, $\mathcal{T} > \mathcal{T}_c$ поляронные состояния нестабильны. По результатам моделирования можно предположить, что для малых \mathcal{T}_c ($k_B T^* \mathcal{T}_c \ll |E_{pol}|$) и больших N время разрушения начального поляронного состояния 1) не зависит от длины цепочки и 2) экспоненциально зависит от температуры, $\ln t \propto \mathcal{T}^{-1}$.

6. ОБСУЖДЕНИЕ

В данной статье приведены результаты моделирования температурного развала полярона для цепочек разной длины. При параметрах модели, взятых из работы Холстейна [31], развал полярона, например в 5-сайтовой цепочке происходит при $\tilde{T} > 600$ К, а в 30-сайтовой цепочке — в области температур 60–80 К (см. рис. 2). Вообще говоря, полуклассическое описание (1) справедливо для температур выше дебаевской температуры Θ ($k_B \Theta = \hbar\omega$; при выбранных параметрах $\Theta \approx 460$ К). В рассматриваемом диапазоне температур полуклассическое описание (1) становится неточным, результаты моделирования носят качественный характер, хотя и согласуются с картиной разрушения поляронного состояния, описанной в работе [31]. При изучении зависимости диффузии от температуры в квантовомеханической модели Холстейн нашел, что при температурах $\tilde{T} < \tilde{T}_t \approx 0.5\Theta$ проявляет себя поляронный механизм распространения заряда, а при $\tilde{T} > \tilde{T}_t$ полярон разрушается. В полуклассическом описании по результатам численного моделирования получается, что поляронные состояния разрушаются при $N k_B \tilde{T} \approx 0.5 |E_{pol}|$.

Таким образом, полуклассическое описание дает качественно другую картину. При последовательном квантовомеханическом описании температурного развала полярона вопрос о длине цепочки вообще не стоит. Результаты Холстейна формально справедливы для бесконечной цепочки. Как показано в работе [37], в полуклассической модели Холстейна (когда рассматривается бесконечная классическая цепочка) равновесного поляронного состояния не существует вообще. Это общий дефект полуклассического описания, и он не зависит от вида модели: оптические фононы, как у Холстейна, или акустические, как у Давыдова.

Отсюда вытекает общая рекомендация для тех, кто занимается моделированием переноса энергии и заряда на основе поляронного (солитонного) механизма. При конкретном моделировании с использованием полуклассического описания нужно правильно выбрать длину цепочки. Она должна быть такой, чтобы результаты полуклассического моделирования были «похожи» на результаты квантовомеханического подхода.

Авторы выражают искреннюю благодарность рецензенту за ценные замечания. Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты №№ 14-07-00894, 13-07-00256). Авторы благодарны

Межведомственному суперкомпьютерному центру РАН за предоставленные вычислительные мощности.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. S. Davydov, *J. Theor. Biology* **38**, 559 (1973).
2. A. S. Davydov, *J. Theor. Biology* **66**, 379 (1977).
3. A. S. Davydov, *Solitons in Molecular Systems*, Reided Publ. Comp., Boston, USA (1985).
4. A. C. Scott, *Phys. Rep.* **217**, 1 (1992).
5. P. S. Lomdahl and W. C. Kerr, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1235 (1985).
6. A. F. Lawrence, J. C. McDaniel, D. B. Chang et al., *Phys. Rev. A* **33**, 1188 (1986).
7. X. Wang, D. W. Brown, and K. Lindenberg, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1796 (1989).
8. D. Vitali, P. Allegrini, and P. Grigolini, *Chem. Phys.* **180**, 297 (1994).
9. M. I. Salkola, A. R. Bishop, V. M. Kenkre, and S. Raghavan, *Phys. Rev. B* **52**, R3824 (1995).
10. A. V. Savin and A. V. Zolotaryuk, *Physica D* **68**, 59 (1993).
11. L. Cruzeiro-Hansson, *Europhys. Lett.* **33**, 655 (1996).
12. L. Cruzeiro-Hansson, *Phys. Lett. A* **223**, 383 (1996).
13. L. Cruzeiro-Hansson and S. Takeno, *Phys. Rev. E* **56**, 894 (1997).
14. P. S. Lomdahl and W. C. Kerr, in *Davydov's Soliton Revisited. Self-Trapping of Vibrational Energy in Protein*, ed. by P. L. Christiansen and A. C. Scott, NATO ASI Series B: Physics (1990), Vol. 243, p. 259.
15. W. Ebeling, M. G. Velarde, and A. P. Chetverikov, *Condens. Matter Phys.* **12**, 633 (2009).
16. D. M. Basko and E. M. Conwell, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 098102-1 (2002).
17. A. Voityuk, *J. Chem. Phys.* **122**, 204904 (2005).
18. A. N. Korshunova and V. D. Lakhno, *Physica E* **60**, 206 (2014).
19. В. Д. Лахно, Н. С. Фиалко, *Ж. физ. химии* **86**, 928 (2012).
20. D. Hennig, C. Neissner, M. G. Velarde, and W. Ebeling, *Phys. Rev. B* **73**, 024306 (2006).
21. M. G. Velarde, A. P. Chetverikov, W. Ebeling et al., *Int. J. Bifurcation and Chaos* **20**, 185 (2010).
22. M. G. Velarde, L. Brizhik, A. P. Chetverikov et al., *Int. J. Quant. Chem.* **112**, 551 (2012).
23. F. C. Grozema, Y. A. Berlin, and L. D. A. Siebbeles, *Int. J. Quant. Chem.* **75**, 1009 (1999).
24. F. C. Grozema, Y. A. Berlin, and L. D. A. Siebbeles, *J. Amer. Chem. Soc.* **122**, 10903 (2000).
25. N. S. Fialko and V. D. Lakhno, *Phys. Lett. A* **278**, 108 (2000).
26. В. Д. Лахно, Н. С. Фиалко, *Письма в ЖЭТФ* **78**, 786 (2003).
27. V. D. Lakhno and N. S. Fialko, *Eur. Phys. J. B* **43**, 279 (2005).
28. E. M. Conwell and S. V. Rakhmanova, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **97**, 4556 (2000).
29. D. M. Basko and E. M. Conwell, *Phys. Rev. E* **65**, 061902 (2002).
30. E. M. Conwell, P. M. McLaughlin, and S. M. Bloch, *J. Phys. Chem. B* **112**, 2268 (2008).
31. T. Holstein, *Ann. Phys.* **8**, 343 (1959).
32. T. Holstein, *Ann. Phys.* **8**, 325 (1959).
33. P. Turg, F. Lantelme, and H. L. Friedman, *J. Chem. Phys.* **66**, 3039 (1977).
34. E. Helfand, *J. Chem. Phys.* **69**, 1010 (1978).
35. H. S. Greenside and E. Helfand, *Bell System Techn. J.* **60**, 1927 (1981).
36. Н. С. Фиалко, *Компьютерные исслед. и моделир.* **2**, 63 (2010).
37. В. Д. Лахно, Н. С. Фиалко, *Матем. биология и биоинформатика* **9**, 1 (2014).