

DNA 模型的有限格点系的严格对角化解^{*}

黄书文[†] 刘 涛 汪克林

(西南科技大学理学院, 绵阳 621010)

(2009 年 6 月 24 日收到; 2009 年 7 月 15 日收到修改稿)

讨论了 DNA 一维 Holstein 模型的严格对角化求解方法, 在此基础上比较它与相干态变分法的结果, 从而对后者的可靠性及精确程度进行检验, 得到的结果表明两者确有明显的差异, 严格对角化解方法得到的基态能量更低, 达到饱和情形的格点数更少, 本方法不仅可以讨论系统的基态, 而且还能给出其能谱及激发态. 严格对角化解方法对 DNA 的研究较之变分法的讨论有显著的改进.

关键词: Holstein 模型, 严格对角化解, 基态能量, 能谱

PACC: 7138, 7136

1. 引 言

生命科学中的一个重要的问题是研究 DNA 中的生物化学和生物物理过程, 其中又以 DNA 分子里的电荷运输为目前最受大家关注的焦点之一, 因为它与 DNA 中的基本生物性质紧密相连. 过去几年中有关 DNA 中的电荷运输的实验及理论工作较多, 但关于运输的机理仍存在着不同的看法, 较为普遍的观点倾向于认为是多步跳跃反应和极化子扩散或运输的机理^[1-14], 瑞士巴塞尔大学化学系的一个小组作了直接观察 DNA 中的电荷运输实验, 他们发现电荷运输的效率并不随距离增大而显著下降, 这和多步跳跃反应的结论不符; 而与此同时, 韩国与日本的一个共同研究小组所做的实验结果用极化子跳跃模型可以很好地解释, 此后有不少的理论工作就是按照极化子的思想来讨论 DNA 中的电荷运输.

DNA 是由两根螺旋状一维分子链构成, 在简化的模型中把它看作一维的晶体, 并常常把 DNA 中的电荷与晶体分子间的相互作用用已有的 Holstein 模型或 SSH 模型来描写^[12-15]. 求解一维 Holstein 模型或 SSH 模型. 首先碰到的一个困难是这一系统为一个多格点的系统, 它的自由度很多, 既包含格点上多个原子或离子, 又包含每个格点上的定域声子, 所以我们称它为一个多分量和多模的系统. 显而易

见, 不论用何种理论工具去讨论这类问题都会碰到随着考虑的格点数越多时计算难度越大的问题. 文献[15]用 Holstein 模型来作 DNA 中的电荷运输的计算, 他们在晶格分子振动不作量子化的情形下用数值计算求有限格点数的一维晶体中的基态, 另一方面, 实际的 DNA 如用一维晶体来近似描写, 原则上对应于一个大量格点数的晶体, 认真计算这样大的晶体远远超出了数值计算的能力. 所幸的是实际上并不需要计算到很大格点数的情况而只要当计算到一定大的格点数时, 极化子主要性质的结果已不再随着晶格的格点数的增加而改变, 即达到饱和的状态就可以了, 文献[15]中就是利用这一种考虑而只计算格点数到 20, 因为此时算出的极化子基态能量在强耦合的情况下已能看出达到饱和, 但在那里还留下耦合弱时还看不出是否确定地达到饱和的问题. 在文献[16]我们针对文献[15]可以改进的地方用全量子化的变分方法对这一问题重新进行了计算, 把这一问题向前推动了一步, 即把晶格振动的经典处理改变成量子化的情形使之成为完全量子化的理论, 再用变分的方法进行计算, 正如文献[16]的结果显示, 全量子化处理后在不同的 B 参量下, 计算的基态能量的确在所有的情况下都比文献[15]得到的基态能量低, 而且在文献[15]中 $B = 1$ 的情形下, 他们得到的基态能量随格点数增大的变化曲线仍未达到饱和的结论亦得到改变, 因为量

* 四川省教育厅基金(批准号:041139)资助的课题.

† E-mail: huangshuwen@swust.edu.cn

子化后计算不到 20 个格点时已达到饱和. 不过, 由于变分法仍然只是一种近似方法, 由它得到的结果的精确程度究竟有多高是值得考虑的问题. 特别是用它来讨论 DNA 时, 寻找一个严格的理论方法去求解这一问题是有重要价值的.

本文的目的就是讨论 DNA 一维 Holstein 模型的严格对角化解方法, 在此基础上比较它与相干态变分法的结果, 从而对后者的可靠性及精确程度进行检验. 本文得到的结果表明两者确有明显的差异, 说明这项工作是必要的.

2. 严格对角化解方法

DNA 分子中的电荷及晶格分子振动或定域声子耦合系统的哈氏量如下:

$$H = -t \sum_{i=1}^N [c_i^+ c_{i+1} + c_i^+ c_{i-1}] + \omega \sum_{i=1}^N b_i^+ b_i + g \sum_{i=1}^N c_i^+ c_i (b_i^+ + b_i), \quad (1)$$

其中 $c_i (c_i^+)$ 是电荷在格点 i 处的湮没(产生)算符, $b_i (b_i^+)$ 是 i 格点的定域声子的湮没(产生)算符, t 是电荷跳跃的常数, ω 是定域声子频率, g 是电荷与声子间的耦合常数. 根据以往对 Holstein 能带结构的讨论, 自然设解的形式为

$$| \rangle = \sum_{j=1}^N c_j^+ | \varphi_j \rangle | 0 \rangle_e, \quad (2)$$

$$H | \rangle = -t \sum_{i=1}^N [c_i^+ | \varphi_{i+1} \rangle + c_i^+ | \varphi_{i-1} \rangle] | 0 \rangle_e + \omega \sum_{i=1}^N b_i^+ b_i \sum_{j=1}^N c_j^+ | \varphi_j \rangle | 0 \rangle_e + g \sum_{i=1}^N c_i^+ (b_i^+ + b_i) | \varphi_i \rangle | 0 \rangle_e = E \sum_{j=1}^N c_j^+ | \varphi_j \rangle | 0 \rangle_e. \quad (3)$$

(3) 式两边左乘 ${}_e \langle 0 | c_j$ 得到

$$-t [| \varphi_{j+1} \rangle + | \varphi_{j-1} \rangle] + \omega \sum_{i=1}^N b_i^+ b_i | \varphi_j \rangle + g (b_j^+ + b_j) | \varphi_j \rangle = E | \varphi_j \rangle, \quad (4)$$

$$-t [| \varphi_{j+1} \rangle + | \varphi_{j-1} \rangle] + \omega \sum_{i=1, i \neq j}^N b_i^+ b_i | \varphi_j \rangle + \omega b_j^+ b_j | \varphi_j \rangle$$

$$+ g (b_j^+ + b_j) | \varphi_j \rangle = E | \varphi_j \rangle. \quad (5)$$

引入 $B_j^+ = b_j^+ + \frac{g}{\omega}, B_j = b_j + \frac{g}{\omega}, B^+, B$ 满足玻色算符的基本对易式, 则(5)式改写为

$$-t [| \varphi_{j+1} \rangle + | \varphi_{j-1} \rangle] + \omega \sum_{i=1, i \neq j}^N b_i^+ b_i | \varphi_j \rangle + \omega [B_j^+ B_j - \frac{g^2}{\omega^2}] | \varphi_j \rangle = E | \varphi_j \rangle, \quad (6)$$

其中

$$| \varphi_j \rangle = \sum_{m_1 \dots m_N=0}^{N_{ph}} c_{j, m_1 \dots m_N} | m_j \rangle_B \prod_{\substack{r=1 \\ r \neq j}}^N | m_r \rangle, \quad (7)$$

$$| m_j \rangle_B = \frac{1}{\sqrt{m_j!}} (B_j^+)^{m_j} e^{-\alpha b_j^+ - \alpha^2/2} | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{m_j!}} (b_j^+ + \alpha)^{m_j} e^{-\alpha b_j^+ - \frac{\alpha^2}{2}} | 0 \rangle, \quad (8)$$

$| m_j \rangle_B$ 为 B_j 空间 Fock 态, $| m_r \rangle$ 为 b_r 空间 Fock 态.

将 $\prod_{\substack{r=1 \\ r \neq j}}^N \langle n_r | {}_B \langle n_j |$ \times (6) 式, 我们有

$$-t [\sum_{m_j, m_{j+1}} c_{j+1, n_1 \dots m_j m_{j+1} \dots n_N} \langle n_j | m_j \rangle \langle n_{j+1} | m_{j+1} \rangle_B + \sum_{m_{j-1}, m_j} c_{j-1, n_1 \dots m_{j-1} m_j \dots n_N} \langle n_j | m_j \rangle \langle n_{j-1} | m_{j-1} \rangle_B] + [\sum_{i=1}^N n_i \omega - \frac{g^2}{\omega}] c_{j, n_1 \dots n_N} = E c_{j, n_1 \dots n_N}, \quad (9)$$

这里

$${}_B \langle n_j | m_j \rangle = (-1)^{m_j} e^{-\alpha^2/2} \times \sum_{i=0}^{\min[m_j, n_j]} \frac{(-1)^i \sqrt{m_j! n_j!} \alpha^{m_j+n_j-2i}}{(m_j-i)! (n_j-i)! i!} = (-1)^{m_j} D_{j, n_j m_j},$$

$$\langle n_j | m_j \rangle_B = (-1)^{n_j} D_{j, n_j m_j}, \alpha = \frac{g}{\omega}.$$

现在(9)式重写为

$$-t [\sum_{m_j, m_{j+1}} c_{j+1, n_1 \dots m_j m_{j+1} \dots n_N} (-1)^{m_j+n_{j+1}} D_{j, n_j m_j} D_{j+1, n_{j+1} m_{j+1}} + \sum_{m_{j-1}, m_j} c_{j-1, n_1 \dots m_{j-1} m_j \dots n_N} (-1)^{m_j+n_{j-1}} D_{j-1, n_{j-1} m_{j-1}} D_{j, n_j m_j}] + [\sum_{i=1}^N n_i \omega - \frac{g^2}{\omega}] c_{j, n_1 \dots n_N} = E c_{j, n_1 \dots n_N}. \quad (10)$$

在周期性边界条件下求解本征方程(10)可以得到系统的本征能量 $\{ E^{(l)} \}$ 及相应的态矢系数 $\{ c_{j, n_1 \dots n_N}^{(l)} \}$.

3. 结 论

为了便于与变分方法得到的结果相比较,令 $E/t = \varepsilon, g^2/(t\omega) = B, \omega = 1$, 在相同的参量下分别列出文献[16]和本文得到的结果.

1. 由表 1—3 可以看出本文的严格对角化解方法比变分方法得到的基态能量更低, 相对误差大约是 1.5%—23% (在 $B = 10$ 时约 12.8%). 可见本文的方法对 DNA 的研究较之变分法去讨论有显著的改进, 因为具体在讨论 DNA 的各种性质时运用严格

对角化解方法可以得到更为精确的结果.

2. 由表 1—3 可以看出严格对角化解方法达到的饱和情形的格点数更少. 从得到的结果看, 不需计算到 20 格点, 在所有的参量情况下, 只要计算到 10 个格点, 已经接近饱和, 因为表 1—3 列出的结果可以看出在 10 格点左右时再增加格点计算出的基态能已几乎没有变化.

3. 本文的另一个有意义的改进是不仅可以讨论系统的基态, 同时还能给出系统的能谱. 图 1 给出不同参量下系统能谱.

4. 有了能谱就可以考虑实际有限温度下 DNA

表 1 严格解与 CA 方法变分计算的比较 ($B = 1, g = 0.5, t = 0.25$)

$B = 1$ $g = 0.5$	N					
	2	4	6	8	10	12
$\varepsilon_{\text{Exact}}$	-0.68951	-0.68001	-0.67977	-0.67965	-0.67778	-0.67778
ε_{CA}	-0.62500	-0.56250	-0.54167	-0.53125	-0.52512	-0.52711
$((\varepsilon_{\text{Exact}} - \varepsilon_{\text{CA}})/\varepsilon_{\text{Exact}})/\%$	9.4	17.3	20.0	21.8	22.5	22.2

表 2 严格解与 CA 方法变分计算的比较 ($B = 10, g = 0.5, t = 0.025$)

$B = 10$ $g = 0.5$	N					
	2	4	6	8	10	12
$\varepsilon_{\text{Exact}}$	-0.25390	-0.25390	-0.25390	-0.25390	-0.25390	-0.25390
ε_{CA}	-0.25005	-0.25003	-0.25002	-0.24968	-0.25002	-0.25002
$((\varepsilon_{\text{Exact}} - \varepsilon_{\text{CA}})/\varepsilon_{\text{Exact}})/\%$	1.5	1.5	1.5	1.7	1.5	1.5

表 3 严格解与 CA 方法变分计算的比较 ($B = 100, g = 0.5, t = 0.0025$)

$B = 100$ $g = 0.5$	N					
	2	4	6	8	10	12
$\varepsilon_{\text{Exact}}$	-0.28970	-0.28975	-0.28954	-0.28954	-0.28950	-0.28950
ε_{CA}	-0.25500	-0.25251	-0.25250	-0.25250	-0.25250	-0.25250
$((\varepsilon_{\text{Exact}} - \varepsilon_{\text{CA}})/\varepsilon_{\text{Exact}})/\%$	12.0	12.9	12.8	13.8	12.8	12.8

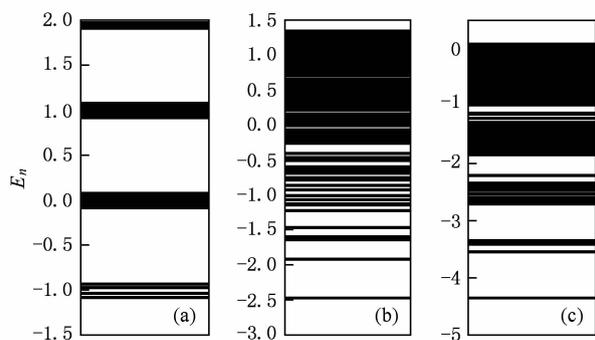


图 1 六格点系统不同参量下能谱 ($g = 1, \omega = 1, n = 1, \dots, 300$)

(a) $t = 0.1$; (b) $t = 1$; (c) $t = 2$

的行为.

例如, 只有在绝对零度下 DNA 的最低能态才取基态, 在有限温度下系统处于基态及各激发态都有一定的概率, 我们计算了 6 格点系统不同温度下系统的稳定的能量 (表 4). 这一稳定的能量按公式

$$\bar{E} = \frac{\sum_i E_i e^{-E_i/k_B T}}{\sum_i e^{-E_i/k_B T}}$$

计算, 其中 k_B 是玻尔兹曼常数, T 是绝对温度, E_i 是基态及各个激发态的能量. 在 $t = 0.1, g = 1, \omega = 1$ 下, 基态能量为 -1.08645067134030 , 而在 $1-30$ K 的这个温度范围内系统的稳定能量与基态能量相比变化甚微, 到室温 (300 K) 左右时能量变化有

1. 283% 大小.

表 4 $t=0.1, g=1, \omega=1$

$E(T=1)$	$E(T=30)$	$E(T=300)$
-1.08645067134030	-1.08645066346304	-1.07251068858793

从本文讨论的内容及文献 [15,16] 同样讨论 DNA 的晶格模型的不同方法作一比较,可以看出,

为了使所得的结果更加精确,需要在方法上更多和更为细致的分析和计算,特别是用精确的方法需要付出的计算量比变分法要多很多,不过从得到的结果看出这种努力是值得的,精确的严格对角化方法较之变分法的结果改善了不少,本文除得到精确的基态能量外也得到了全部的能谱,为计算在不同温度下 DNA 的各种性质提供了基础.

[1] Endres R G, Cox D L, Singh R R P 2004 *Rev. Mod. Phys.* **76** 195

[2] Tadao T, Kiyohiko K, Mamoru F, Tetsuro M 2004 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **101** 14002

[3] Kalosakas G, Rasmussen K Ø, Bishop A R 2003 *J. Chem. Phys.* **118** 3731

[4] Giese B, Amaudrut J, Ke'hler A K, Spormann M, Wessely S 2001 *Nature* **412** 318

[5] Yoo K H, Da D H, Lee J O, Park J W, Kim J H, Kim J J, Lee H Y, Kawai T, Choi H Y 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 198102

[6] Xie P, Dou S X, Wang P Y 2005 *Chin. Phys.* **14** 744

[7] Sheng Y B, Li J, Ma B L, Wang W 2005 *Chin. Phys.* **14** 2365

[8] Deng C, Weng Y M, Xu Z Z, Fei L 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2434 (in Chinese) [邓 闯、翁渝民、徐至中、费 伦 2005 物理学报 **54** 2434]

[9] Heim T, Me'lin T, Deresmes D, Vuillaume D 2003 *Appl. Phys. Lett.* **85** 2637

[10] Thomas H, Dominique D and Dominique V 2004 *J. Appl. Phys.* **96** 2927

[11] Yu Z G, Vo Anh, Gong Z M, Long S C 2002 *Chin. Phys.* **11** 93

[12] Li W, Wang P Y, Dou S X, Tong P Q 2003 *Chin. Phys.* **12** 96

[13] Barnett R N, Cleveland C L, Joy A, Landman U, Schuster G B 2001 *Science* **294** 567

[14] Gervasio F L, Carloni P, Parrinello M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 108102

[15] Alexandre S S, Artacho E, Solar J M, Chacham H 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 108105

[16] Liu Tao, Wang Y, Wang K L 2007 *Chin. Phys.* **16** 0272

[17] Yang Z Y, Hao Y 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2883 (in Chinese) [杨子元、郝 跃 2005 物理学报 **54** 2883]

[18] Kou Z Q, Di N L, Ma X, Li Q A, Cheng Z H 2005 *Chin. Phys.* **14** 1653

[19] Wang K L, Chen Q H, Wan S L 1994 *Acta Phys. Sin.* **43** 433 (in Chinese) [汪克林、陈庆虎、完绍龙 1994 物理学报 **43** 433]

[20] Huang S W, Liu T, Fan Y X, Wang K L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 433 (in Chinese) [黄书文、刘 涛、范云霞、汪克林 2007 物理学报 **56** 433]

[22] Zhang Z J, Wang K L, Qin G 2005 *Chin. Phys.* **14** 1317

[23] Liu T, Feng M, Wang K L 2005 *Phys. Lett. A* **337** 487

Exact diagonalization solution of DNA model systems of limited grid*

Huang Shu-Wen[†] Liu Tao Wang Ke-Lin

(The School of Science, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China)

(Received 24 June 2009; revised manuscript received 15 July 2009)

Abstract

A exact diagonalization solution method for solving the one-dimensional Holstein model of DNA is discussed in this paper. We compared the results of this paper with the former results of coherent state variational method (CVM) to check the reliability and accuracy of CVM. It is clearly seen that the ground state energy calculated by exact diagonalization solution method is considerably smaller than that of the CVM and can reach the saturation with smaller site number. With the strict method we can not only obtain the ground state energy, but also the spectra of all excited states. Therefore there is a significant improvement in the studying of Holstein model than the former CVM.

Keywords: Holstein model, exact diagonalization solution, ground-state energy, spectrum

PACC: 7138, 7136

* Project supported by the Foundation From Sichuan Provincial Department of Education (Grant No. 041139).

[†] E-mail: huangshuwen@swust.edu.cn