

# COOLING A MOLECULAR CHAIN WITH A CHARGE

*N. S. Fialko*<sup>1,\*</sup>, *V. D. Lakhno*<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institute of Mathematical Problems of Biology, RAS — the Branch of KIAM RAS,  
Pushchino, Russia

Based on the Holstein Hamiltonian, the charge dynamics in a chain of sites is investigated at finite temperatures. Previously, we compared results obtained for canonical ensemble and for microcanonical description. According to the simulation results, the transition from the polaron mode to the delocalized state occurs in the same range of thermal energy values of a chain of  $N$  sites with the adjustment: for the microcanonical description the temperature does not correspond to the initially set one, but is determined after long-term calculations from the average kinetic energy of the chain. Now, mixed model is considered: first, a polaron is automatically formed in a short chain with Langevin thermostat, and then, the chain is extended by sites with the same temperature. Dynamics of this system in the microcanonical approach, i.e., for a chain in a vacuum, leads to polaron desruption and cooling of the chain. Such effect may be useful in the design of a molecular DNA refrigerator.

В рамках модели Холстейна рассмотрена динамика заряда в цепочке с температурой. Ранее было проведено сравнение результатов, полученных для канонического ансамбля и для микроканонического описания. В обоих случаях переход от режима полярона к делокализованному состоянию происходит в одинаковой области значений тепловой энергии цепочки  $N$  сайтов с уточнением: для микроканонического описания температура не соответствует начально заданной, а определяется на больших расчетных временах из средней кинетической энергии цепочки. Рассмотрена комбинированная модель: сначала полярон автоматически формируется в короткой цепочке с температурой, задаваемой термостатом Ланжевена, затем цепочка удлиняется сайтами с этой же температурой. Динамика новой системы в микроканоническом описании, т. е. для цепочки в вакууме, приводит к разрушению полярона и к охлаждению цепочки. Описанный эффект, возможно, будет полезен при конструировании молекулярного ДНК холодильника.

PACS: 05.40.Jc; 05.45.-a

---

\* E-mail: fialka@impb.ru