



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 16 за 2018 г.



ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

**Фиалко Н.С., Пятков М.И.,  
Лахно В.Д.**

Динамика заряда в  
однородной цепочке с  
дефектом

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Фиалко Н.С., Пятков М.И., Лахно В.Д.  
Динамика заряда в однородной цепочке с дефектом // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018.  
№ 16. 12 с. doi:[10.20948/prepr-2018-16](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-16)  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-16>

**Ордена Ленина  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М.В.Келдыша  
Российской академии наук**

**Н.С. Фиалко, М.И. Пятков, В.Д. Лахно**

**Динамика заряда в однородной цепочке  
с дефектом**

**Москва — 2018**

***Фиалко Н.С., Пятков М.И., Лахно В.Д.***

### **Динамика заряда в однородной цепочке с дефектом**

Рассматривается модель Холстейна в полуклассическом приближении, описывающая динамику заряда в одномерной цепочке сайтов. Ранее было показано, что в однородных цепочках разрушение поляронных состояний зависит не только от температуры термостата, но и от количества сайтов, т.е. от тепловой энергии цепочки. В данной работе с помощью вычислительного эксперимента показано, что эта закономерность выполняется для простейших неоднородных цепочек. Исследован случай адениновых фрагментов ДНК с дефектным сайтом в середине цепочки. Добавление сайта-ловушки повышает температурную устойчивость полярона.

***Ключевые слова:*** перенос заряда в ДНК, модель Холстейна, уравнение Ланжевена, термодинамически равновесное состояние.

***Nadezhda S. Fialko, Maxim I. Pyatkov, Victor Dmitrievich Lakhno***

### **Charge transfer in homogeneous chain with a defect**

Based on the semi-classical Holstein Hamiltonian we consider charge transfer along a DNA chain. Recently it has been shown that the charge distribution in homogeneous chains in thermodynamic equilibrium depends not only on the temperature, but also on the length of the chain. We have studied numerically the case of DNA fragments consisting of adenines with a defect site in the middle of the chain. The results demonstrate qualitatively similar behavior of thermodynamic equilibrium quantities in the case of homogeneous chain and of the chain with a defect. Insertion of a trap-site enhances the stability of polaron states.

***Key words:*** charge transfer in DNA, Holstein model, Langevin equation, thermodynamic equilibrium state

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты 16-07-00305-а и 17-07-00801-а.

## Оглавление

Введение .....	3
1. Модель переноса заряда .....	4
2. Численные эксперименты.....	5
3. Результаты моделирования .....	7
Заключение.....	10
Список литературы.....	10

### Введение

Вопрос о возможных механизмах переноса энергии или избыточного заряда вдоль квазиодномерных молекулярных цепочек представляет интерес для биофизики и нанобиоэлектроники. В 70-е годы прошлого века А.С.Давыдов показал, что вибрационные внутримолекулярные возбуждения могут двигаться вдоль  $\alpha$ -спирали белковой молекулы как солитоны, без диссипации [1,2]. Благодаря своей стабильности, поляронный механизм переноса заряда привлекает внимание большого числа исследователей. В настоящее время сложилось представление, что носителями тока в ДНК являются поляроны или солитоны, см., например, [3–5] и ссылки в них. Этому убеждению в значительной мере способствует тот факт, что ДНК является квазиодномерной системой, в которой избыточные заряды – электроны или дырки – в случае их сильного взаимодействия с колебательными степенями свободы молекулы переходят в поляронные состояния.

На сегодняшний день опубликовано большое количество результатов моделирования, демонстрирующих движение полярона на большое расстояние вдоль невозмущенной молекулярной цепочки. Теоретические исследования и вычислительные эксперименты по динамике полярона под влиянием температурных флуктуаций [6–8] показали, что полярон разрушается при температуре, гораздо меньшей, чем его энергия связи.

Ранее в работах [9,10] в модели Холстейна распространения заряда в квазиодномерных молекулярных цепочках в термостате прямым моделированием были рассчитаны значения полной энергии системы, электронной части энергии и параметра делокализации в термодинамически равновесном состоянии для однородных цепочек. Рассматривались цепочки

при величинах параметров для однородных адениновых, гуаниновых и тиминных фрагментов ДНК. Во всех случаях получилась качественно одинаковая картина: чем длиннее цепочка, тем ниже критическая температура, выше которой заряд находится в делокализованном состоянии, и наоборот, чем короче цепочка, тем выше температура развала полярона. Находится заряд в поляронном или делокализованном состоянии – зависит не от температуры, а от тепловой энергии цепочки.

В данной работе моделируется динамика заряда в «почти однородной» цепочке – в середину однородной цепочки добавлен один сайт с дефектом, который служит акцептором заряда. Рассматриваются адениновые фрагменты, для сайта-ловушки использовались модельные параметры, а также рассмотрены цепочки вида А...АГА...А, в центр аденинового фрагмента добавлен гуанин. Одно из наиболее распространенных повреждений ДНК, возникающих в результате миграции дырок вдоль цепи, – модификация гуанина в 8-оксогуанин [11]. Повреждение оснований ДНК может быть источником мутаций, которые приводят к различным патологиям человека.

## 1. Модель переноса заряда

Модель основана на гамильтониане Холстейна для дискретной цепочки сайтов [12]. В полуклассическом приближении, при выборе волновой функции  $\Psi$  в виде  $\Psi = \sum_{n=1}^N b_n |n\rangle$ , где  $b_n$  – амплитуда вероятности нахождения заряда (электрона или дырки) на  $n$ -ом сайте ( $n=1, \dots, N$ ,  $N$  – длина цепочки), усредненный гамильтониан имеет вид:

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

Здесь  $v_{mn}$  ( $m \neq n$ ) – матричные элементы перехода заряда между  $m$ -м и  $n$ -м сайтами (зависящие от интеграла перекрытия),  $v_{nn}$  – энергия электрона на  $n$ -ом сайте. Мы рассматриваем приближение ближайших соседей, т.е.  $v_{mn} = 0$ , если  $m \neq n \pm 1$ . Полагаем, что внутрисайтовые колебания  $\tilde{u}_n$  относительно центра масс малы и могут считаться гармоническими; полагаем линейной зависимость вероятности нахождения заряда на сайтах от смещений сайтов  $\tilde{u}_n$ ,  $\alpha'$  – константа связи квантовой и классической подсистем,  $M$  – эффективная масса сайта,  $K$  – упругая постоянная.

Уравнения движения гамильтониана (1) имеют вид:

$$i\hbar \frac{db_n}{d\tilde{t}} = v_{n,n-1}b_{n-1} + v_{n,n}b_n + v_{n,n+1}b_{n+1} + \alpha' \tilde{u}_n b_n, \quad (2)$$

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

В подсистему (3) для моделирования термостата добавлены член с трением ( $\tilde{\gamma}$  – коэффициент трения) и случайная сила  $A_n(\tilde{t})$  со свойствами  $\langle A_n(\tilde{t}) \rangle = 0$ ,  $\langle A_n(\tilde{t}) A_m(\tilde{t} + \tilde{s}) \rangle = 2k_B T \tilde{\gamma} \delta_{nm} \delta(\tilde{s})$  ( $T$  – температура [K]). Такой способ имитации температуры окружающей среды с помощью уравнений Ланжевена (3) давно известен [8, 13, 14].

Уравнения движения (2), (3) после обезразмеривания имеют вид

$$i\dot{b}_n = \eta_{n,n-1}b_{n-1} + \eta_{n,n}b_n + \eta_{n,n+1}b_{n+1} + \chi u_n b_n, \quad (4)$$

$$\ddot{u}_n = -\omega^2 u_n - \chi |b_n|^2 + \gamma \dot{u}_n + \xi Z_n(t). \quad (5)$$

Безразмерные величины связаны с размерными параметрами следующим образом. Выберем характерное время  $\tau$ ,  $\tilde{t} = \tau t$ , и характерный масштаб колебаний  $U^*$ ,  $\tilde{u}_n = U^* u_n$ . Матричные элементы  $\eta_{nm} = v_{nm} \tau / \hbar$ , частоты колебаний сайтов  $\omega = \sqrt{\tau^2 K / M}$ . При обезразмеривании константы связи  $\alpha'$  квантовой и классической частей системы потребуем равенства коэффициентов при члене  $u_n b_n$  в (4) и при члене  $-|b_n|^2$  в (5). Тогда  $U^* = \sqrt{\tau \hbar / M}$  и  $\chi = \alpha' \sqrt{\tau^3 / \hbar M}$ .  $Z_n(t)$  – случайная величина с распределением

$$\langle Z_n(t) \rangle = 0, \quad \langle Z_n(t) Z_n(t + t') \rangle = \delta(t');$$

$$\xi = \sqrt{2k_B T^* \tau / \hbar} \sqrt{\gamma T},$$

где безразмерная температура  $T = T / T^*$ .

Как известно, в однородных цепочках при  $T=0$  самым энергетически выгодным состоянием будет полярон [12], когда заряд локализован на нескольких сайтах цепочки; эти сайты смещаются, и энергия классической подсистемы становится положительной, однако полная энергия системы имеет наименьшее значение.

## 2. Численные эксперименты

При заданной температуре термостата  $T$  проводился расчет множества реализаций (траекторий системы (4), (5) из разных начальных данных и с

разными временными «случайными» последовательностями), и считаются средние по реализациям временные зависимости. Расчеты отдельных реализаций выполнялись 2o2s1g-методом [15] с добавлением искусственной нормировки (полная вероятность нахождения заряда в системе  $\sum |b_n|^2 = 1$ , переменные  $b_n$  «подправляются» так, чтобы сумма квадратов их модулей равнялась единице).

Обычно мы рассматривали 2 набора по сотне реализаций. Первый – из поляронных начальных данных (с наиминимизированной энергией), и второй – из равномерного распределения заряда  $|b_n|^2 = 1/N$ , скорости и смещения сайтов в начальный момент задавались по максвелловскому распределению для заданной температуры. Второй вариант начальных данных соответствует при  $T=0$  наибольшей энергии системы. Расчеты траекторий проводились на больших временных интервалах (см. рис. 1), пока графики средних временных зависимостей для каждого набора реализаций не станут близки. После этого рассчитывалось равновесное значение для заданной температуры термостата  $T$ .

Нас интересуют значение параметра делокализации

$$\langle R(t) \rangle = \left\langle \frac{1}{\sum_n |b_n(t)|^4} \right\rangle$$

после выхода системы на термодинамическое равновесие и его зависимость от температуры  $\langle R(T) \rangle$ .

Очевидно, что если заряд локализован на одном сайте,  $|b_n(t)| \sim 1$ , то  $R(t) \sim 1$ . Если заряд равномерно распределен по  $N$ -сайтовой цепочке,  $|b_n(t)|^2 = 1/N$ , то  $R = N$ . Ранее [9] были рассчитаны температурные зависимости  $\langle R(T) \rangle$  для однородных цепочек разной длины  $N$ . Было показано, что график  $\langle R(T) \rangle$  имеет S-образную форму. При близких к нулю температурах  $\langle R(T) \rangle \sim 1$  (система находится в поляронном состоянии), потом медленный рост с повышением температуры, дальше в узком температурном диапазоне около  $T_{\text{crit}}$  – резкий скачок и опять медленный рост до  $\langle R(T) \rangle \sim N/2$ , при этом заряд находится в делокализованном состоянии.

В этой работе мы рассмотрели простейший случай неоднородности: в середину цепочки одинаковых сайтов добавлен сайт с дефектом. Для однородной цепочки энергии электрона  $\eta_m$  на всех сайтах одинаковы, можно положить  $\eta_m = 0$ . Тогда сайт с энергией электрона  $\eta_m < 0$ , добавленный в центр цепочки, служит ловушкой для заряда. Проведено моделирование для цепочек вида  $A \dots A X A \dots A$ , где  $A$  – аденин (в рамках модели считается, что заряд движется вдоль одной нити ДНК, не перескакивая на комплементарную

тиминовую нить). Параметры модели, соответствующие нуклеотидным парам [16, 17, 18]:  $M = 10^{-21}$  г., террагерцовая частота колебаний сайтов  $\omega = 10^{12}$  сек $^{-1}$  соответствует жесткости водородных связей  $K \sim 0.062$  эВ/Å $^2$ , константа связи  $\chi = 0.13$  эВ/Å. Для соседних аденинов матричный элемент перехода между сайтами  $v_{AA} = 0.030$  эВ,  $v_{nn\pm 1} = -v_{AA}$ . В безразмерных величинах при выборе характерного времени  $\tau = 10^{-14}$  сек это соответствует значениям  $\eta_{AA} = 0.456$ ,  $\omega = 0.01$ ,  $\chi = 0.02$ . Энергия электрона на аденинах  $\eta_A = 0$ , на сайте с дефектом расчеты сделаны для модельных значений энергии электрона  $\eta_X = -1$  ( $v_X \approx 0.066$  эВ) и  $\eta_X = -2$  ( $v_X \approx 0.132$  эВ); матричные элементы перехода  $\eta_{AX} = \eta_{XA} = \eta_{AA}$ .

Для однородных цепочек было показано [10], что средние величины в термодинамическом равновесии зависят не от значений параметров, а от их соотношений: у систем с параметрами  $\{\eta, \omega, \chi\}$  и  $\{\eta, C\omega, C\chi\}$ ,  $C = \text{const}$ ,  $\langle R(T) \rangle$  одинаково, хотя время выхода из поляронного состояния к термодинамически равновесному будет сильно различно. Для неоднородных систем аналогичные выкладки приводят к такому же результату. Поэтому при расчетах мы брали «ускоряющие» параметры  $\omega = 0.5$ ,  $\chi = 1$ .

Также были промоделированы фрагменты A...AGA...A. Значения матричных элементов перехода  $\eta_{AG} = 0.744$  ( $v_{AG} = 0.049$  эВ),  $\eta_{GA} = 1.352$  ( $v_{GA} = 0.089$  эВ), энергия электрона на гуанине  $\eta_X = -6.84$  (разница с аденином  $\approx 0.45$  эВ). Рассматривались цепочки длиной  $N = 19$  и  $N = 40$  сайтов.

### 3. Результаты моделирования

Время выхода к термодинамически равновесному состоянию увеличивается с ростом  $|\eta_X|$ . На рис. 1 приведены зависимости от времени параметра делокализации  $\langle R(t) \rangle$  при температуре термостата  $T = 50$  для цепочек длиной 19 сайтов, средние по 95 реализациям.

Сверху идут графики из  $|b_n(0)|^2 = 1/19$ , снизу – из поляронных начальных данных. Черная и серая кривые – для однородной цепочки, синяя и голубая – для цепочки с энергией электрона на сайте-ловушке  $\eta_X = -1$ , и красная и розовая – для  $\eta_X = -2$ . Когда графики из разных начальных данных становятся близки, считаем, что система находится вблизи термодинамического равновесия. После этого дополнительным осреднением по времени находим значение  $\langle R(T) \rangle$ , соответствующее заданной температуре.

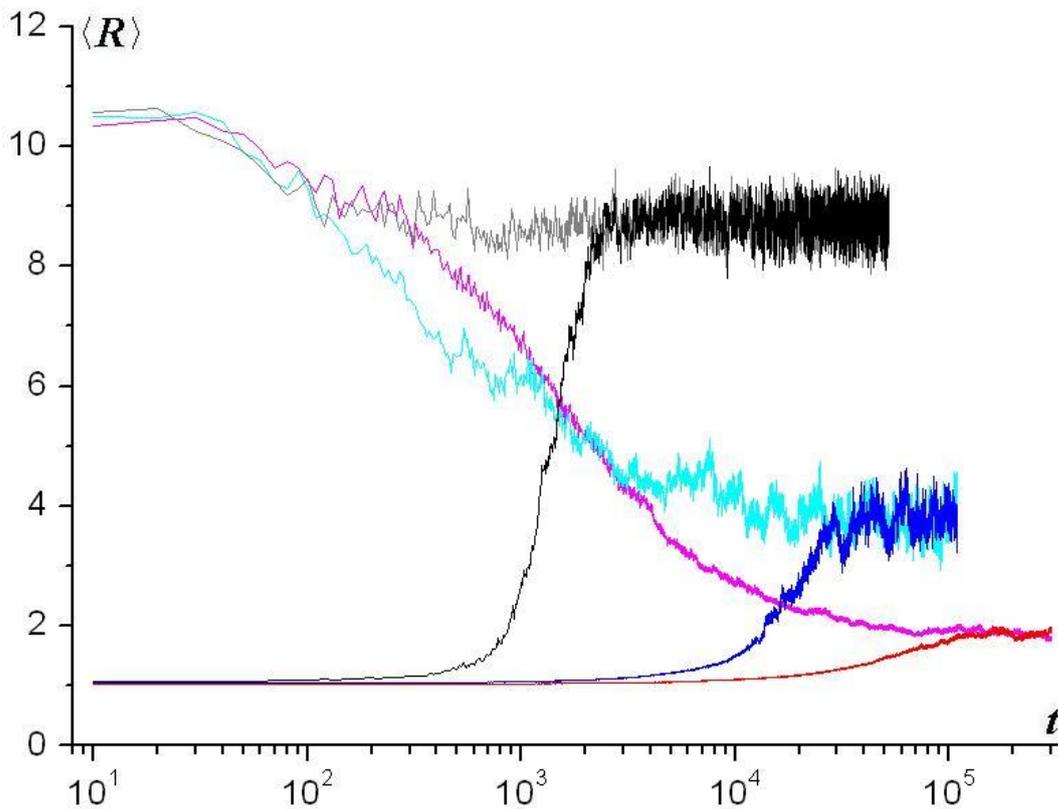


Рис. 1. Зависимости  $\langle R(t) \rangle$  при  $T=50$ ,  $N=19$ , для однородной цепочки (черным и серым цветом), для цепочки с сайтом-ловушкой  $\eta_X = -1$  (синим, голубым) и для  $\eta_X = -2$  (красным, розовым).

Также при понижении  $\eta_X$  увеличивается температурная устойчивость полярона. Например (рис. 1), для однородной цепочки  $\langle R(T=50) \rangle \approx 8.8$  близко к  $N/2 = 9.5$ , т.е. заряд находится в делокализованном состоянии; для цепочки с  $\eta_X = -2$   $\langle R(T=50) \rangle \approx 1.9$  – заряд в основном локализован на сайте-ловушке и находится в поляронном состоянии, и при  $\eta_X = -1$   $\langle R(T=50) \rangle \approx 3.7$  – промежуточная ситуация.

Качественная картина зависимости  $\langle R(T) \rangle$  в цепочках с дефектом такая же, как в однородных цепочках [9]. Если тепловая энергия цепочки, которая в данной модели энергия  $N$  осцилляторов  $E_{cl} = Nk_B T$ , меньше некоторого критического значения  $E_{crit}$ , заряд находится в поляронном состоянии. Для температур, при которых  $E_{cl} > E_{crit}$ , заряд находится в делокализованном состоянии. Т.е.  $\langle R(T) \rangle$  зависит от длины цепочки. Если вместо  $T$  выбрать  $E^* N T$  (для характерной температуры  $T^* = 1$  К безразмерный коэффициент  $E^* \approx 0.0013$ ), то графики для разных  $N$  будут близки в области перехода от полярона к

делокализованному состоянию. На рис. 2 приведены перемасштабированные результаты для цепочек длиной 19 и 40 сайтов.

Из рис. 2 видно, что  $E_{\text{crit}}$  увеличивается при увеличении  $|\eta_X|$ . Довольно очевидный результат: чем глубже яма, тем больше энергии надо, чтобы разрушить поляронное состояние – подтвержден численными экспериментами.

Для однородных адениновых цепочек  $E_{\text{crit}} \sim 0.7$  (рис. 2). Например, для 19-сайтового фрагмента при  $T > 30$  в термодинамически равновесном состоянии заряд делокализован по цепочке. А для адениновых фрагментов со встроенным с середины гуанином  $E_{\text{crit}} \sim 5$ . Это означает, что при биологически значимых температурах  $T \sim 300$  К в коротких фрагментах ДНК такого состава заряд перемещается по полярному механизму, а в более длинных цепочках он находится в делокализованном состоянии. Например, для  $N = 10$  критическая температура перехода  $\sim 400$  К, а для  $N = 19$  заряд делокализован по всей цепочке при  $T > 250$  К.

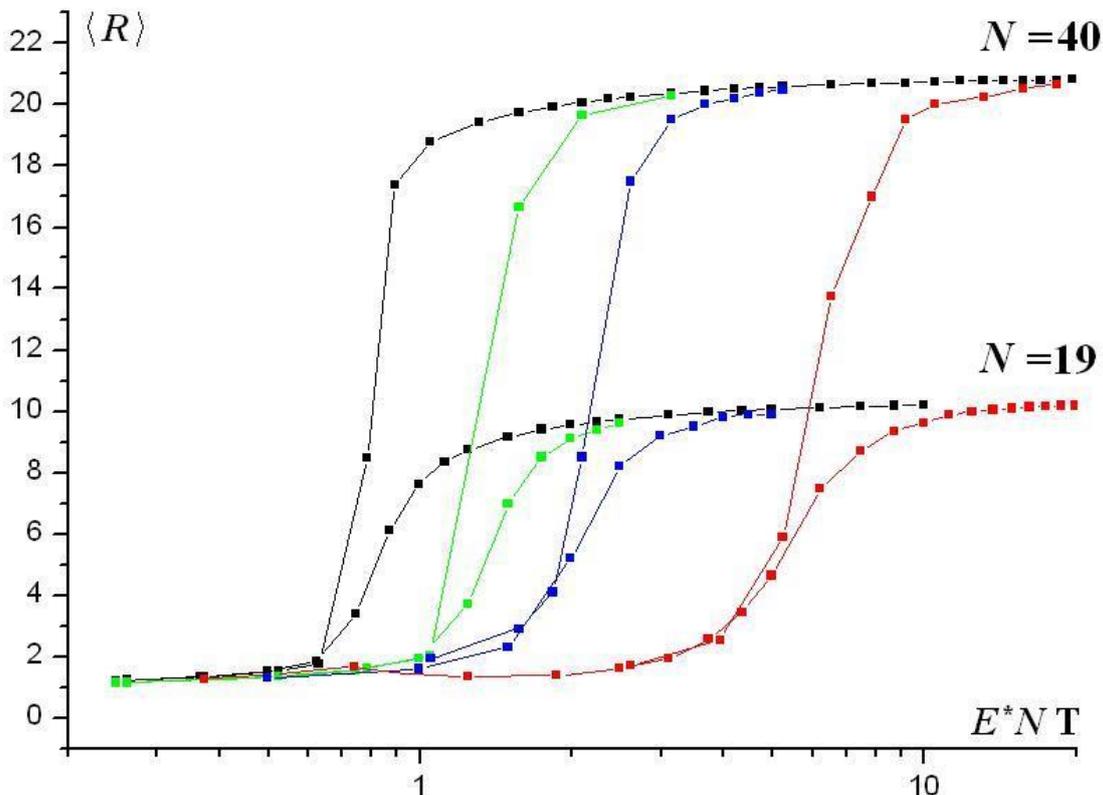


Рис. 2. Зависимости  $\langle R(E^* N T) \rangle$  для однородных цепочек (черные графики), для цепочек с  $\eta_X = -1$  (зеленые),  $\eta_X = -2$  (синие), и для фрагментов А...АГА...А,  $\eta_G = -6.84$  (красные).

## Заключение

В работе прямым моделированием исследован случай, когда в середине однородной цепочки помещен сайт с отрицательной энергией электрона. Показано, что качественная картина средних временных зависимостей параметра делокализации  $R$  для однородной цепочки с сайтом-ловушкой такая же, как для цепочки без дефекта. Когда энергия классической цепочки  $E_{cl} = M_{KB}T$  меньше критической  $E_{crit}$  (при малых температурах термостата), заряд в цепочке находится в поляронном состоянии. Он локализуется на сайте-ловушке. Для больших значений  $E_{cl}$  заряд находится в делокализованном состоянии.

Для цепочки с сайтом-ловушкой чем ниже энергия электрона  $\eta_X$  на сайте с дефектом, тем больше величина  $E_{crit}$ , т.е. при фиксированной длине цепочки  $N$  увеличивается критическая температура развала полярона.

Время выхода к термодинамически равновесному состоянию при одинаковых параметрах  $N$  и  $T$  растёт с увеличением  $|\eta|$ .

Результаты моделирования показывают, что при фиксированной температуре в термодинамически равновесном состоянии системы с увеличением длины цепочки меняется тип распределения заряда. Проведенные в начале двухтысячных годов эксперименты по переносу заряда в ДНК продемонстрировали зависимость от длины и состава нуклеотидной последовательности, в которую инжестируют избыточный заряд [19–21]. Модельные результаты позволяют предположить, что в коротких фрагментах заряд образует полярон, который движется медленно, а в длинных цепочках заряд находится в делокализованном состоянии, и перенос в этом случае происходит быстрее, чем следует из оценок для коротких фрагментов.

## Список литературы

1. A.S. Davydov. Solitons and energy transfer along protein molecules // Journal of Theoretical Biology, 1977, v. 66 (2), p. 379–387. [DOI:10.1016/0022-5193\(77\)90178-3](https://doi.org/10.1016/0022-5193(77)90178-3)
2. А.С. Давыдов. Солитоны в квазиодномерных молекулярных структурах // УФН, 1982, т. 138 (4), с. 603–643. [DOI:10.3367/UFNr.0138.198212c.0603](https://doi.org/10.3367/UFNr.0138.198212c.0603)
3. E.M. Conwell. Charge transport in DNA in solution: The role of polarons // PNAS, 2005, v. 102 (25), p. 8795–8799. [DOI:10.1073/pnas.0501406102](https://doi.org/10.1073/pnas.0501406102)

4. G.B. Schuster (ed.). Long-Range Charge Transfer in DNA II // Topics in Current Chemistry, 2004, v. 237, Springer, 245 p.
5. E.B. Starikov, S. Tanaka, and J.P. Lewis (eds.). Modern Methods for Theoretical Physical Chemistry of Biopolymers // 2006, Elsevier Scientific, Amsterdam, 461 p.
6. S. Komineas, G. Kalosakas, and A. R. Bishop. Effects of intrinsic base-pair fluctuations on charge transport in DNA // Phys. Rev. E, 2002, v. 65 (6), P. 061905. [DOI:10.1103/PhysRevE.65.061905](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.65.061905)
7. L. Cruzeiro-Hansson and S. Takeno. Davydov model: The quantum, mixed quantum-classical, and full classical systems // Phys. Rev. E, 1997, v. 56 (1), P. 894. [DOI:10.1103/PhysRevE.56.894](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.56.894)
8. P.S. Lomdahl, W.C. Kerr. Do Davydov solitons exist at 300K? // Phys. Rev. Lett. 1985, v. 55 (11), p. 1235–1238. [DOI:10.1103/PhysRevLett.55.1235](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.55.1235)
9. В.Д. Лахно, Н.С. Фиалко. О динамике полярона в классической цепочке с конечной температурой // ЖЭТФ, 2015, т. 147 (1), с. 142–148. [DOI:10.7868/S0044451015010125](https://doi.org/10.7868/S0044451015010125)
10. Н.С. Фиалко, Е.В. Соболев, В.Д. Лахно. О расчетах термодинамических величин в модели Холстейна для однородных полинуклеотидов // ЖЭТФ, 2017, т. 151 (4), с. 744–751. [DOI:10.7868/S0044451017040000](https://doi.org/10.7868/S0044451017040000)
11. K.C. Cheng, D.S. Cahill, H. Kasai, S. Nishimura, L.A. Loeb. 8-Hydroxyguanine, an abundant form of oxidative DNA damage, causes G→T and A→C substitutions // J. Biol. Chem., 1992, v. 267 (1), p. 166–172. [URL:jbc.org/abstract](http://jbc.org/abstract)
12. T. Holstein. Studies of polaron motion: Part I. The molecular-crystal model // Annals of Physics, 1959, v. 8 (3), p. 325–342. [DOI:10.1016/0003-4916\(59\)-90002-8](https://doi.org/10.1016/0003-4916(59)-90002-8)
13. E. Helfand. Brownian dynamics study of transitions in a polymer chain of bistable oscillators // J. Chem. Phys., 1978, v. 69 (3), p. 1010–1018. [DOI:10.1063/1.436694](https://doi.org/10.1063/1.436694)
14. P. Turq, F. Lantelme, H.L. Friedman. Brownian dynamics: Its application to ionic solutions // J. Chem. Phys., 1977, v. 66 (7), p. 3039–3044. [DOI:10.1063/1.434317](https://doi.org/10.1063/1.434317)

15. Greenside H.S., Helfand E. Numerical integration of stochastic differential equations - II. // Bell System Technical Journal, 1981, v. 60, p. 1927–1940. [DOI:10.1002/j.1538-7305.1981.tb00303.x](https://doi.org/10.1002/j.1538-7305.1981.tb00303.x)
16. A. A. Voityuk, N. Rosch, M. Bixon, J. Jortner. Electronic Coupling for Charge Transfer and Transport in DNA // J. Phys. Chem. B, 2000, v. 104 (41), p. 9740–9745. [DOI:10.1021/jp001109w](https://doi.org/10.1021/jp001109w)
17. J. Jortner, M. Bixon, A. A. Voityuk, N. Roesh. Superexchange Mediated Charge Hopping in DNA // J. Phys. Chem. A, 2002, v. 106 (33), p. 7599–7606. [DOI:10.1021/jp014232b](https://doi.org/10.1021/jp014232b)
18. F.D. Lewis, Ya. Wu. Dynamics of superexchange photoinduced electron transfer in duplex DNA // J. Photochem. Photobiol. C, 2001, v. 2 (1), p. 1–16. [DOI:10.1016/S1389-5567\(01\)00008-9](https://doi.org/10.1016/S1389-5567(01)00008-9)
19. E. Meggers, M.E. Michel-Beyerle, B. Giese. Sequence Dependent Long Range Hole Transport in DNA // J. Am. Chem. Soc., 1998, v. 120, p. 12950–12955. [DOI:10.1021/ja983092p](https://doi.org/10.1021/ja983092p)
20. B. Giese, J. Amaudrut, A.-K. Kouhler, M. Spormann, S. Wessely. Direct observation of hole transfer through DNA by hopping between adenine bases and by tunnelling // Nature, 2001, v. 412, p. 318–320. [DOI:10.1038/35085542](https://doi.org/10.1038/35085542)
21. M. Bixon, J. Jortner. Energetic Control and Kinetics of Hole Migration in DNA // J. Phys. Chem. B, 2000, 104 (16), pp 3906–3913. [DOI:10.1021/jp9936493](https://doi.org/10.1021/jp9936493)