

# Численное моделирование переноса заряда в полинуклеотидных фрагментах

В.Д.Лахно, Н.С.Фиалко

*Институт математических проблем биологии РАН, г.Пущино*

Исследования процесса переноса заряда в биомакромолекулах, и в частности - вдоль фрагментов ДНК, являются одним из современных направлений в биофизике и биохимии. В настоящее время существуют две основные различные точки зрения на возможный механизм переноса: туннелирование или прыжки, вызванные температурными флуктуациями.

В работе рассматривается квантово-механическая модель возбуждений в многосайтовой системе, которая в случае ДНК состоит из уотсон-криковских пар. Методом численного моделирования исследовалась динамика переноса заряда на расстояние 400-500 ангстрем по однородной нуклеотидной цепочке. Все варианты поведения возбуждения можно разделить на три основных - отсутствие переноса, условный перенос и необратимый перенос.

Также проводились расчёты по цепочке с донором и акцептором. При моделировании донора и акцептора значения параметров брались близкими к экспериментальным величинам. По результатам расчётов можно предположить следующее. Перенос возбуждения происходит, если значения энергии электрона на доноре и акцепторе близки к значениям на "мостиковых" сайтах. Время переноса минимально, если заряд локализован на первом сайте донора, и максимально - при равномерном распределении вероятности по всему донору. Время переноса слабо зависит от расстояния, и сильно зависит от характеристик донора и акцептора.

По результатам экспериментов с переносом электрона на большие расстояния [1, 2] было сделано предположение о солитонном характере переноса заряда [3]. Проведённые расчёты предполагают более сложную картину переноса. Лишь начальная (кратковременная) стадия сходна с поведением солитона. За ней следует довольно длительный период "равномерной размазки" вероятности по всей цепочке, и затем - конгрегация возбуждения на акцепторе.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. H.-W.Fink, C.Schonenberger. Electrical conduction through DNA molecules // *Natura*, 1999, v.398 (6726), p.407-410
2. P.T.Henderson, D.Jones, G.Hampikian, Y.Kan, G.Schuster. Long-distance charge transport in duplex DNA: The phonon-assisted polaron-like hopping mechanism // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 1999, v.96 (15), p.8353-8358
3. V.D.Lakhno. Soliton-like solutions and electron transfer in DNA // *J. Biol. Phys.*, 2000, v.26, p.133-147