Тема магистерской работы: Аспекты резистентности биомолекулы ДНК

М.А. Галченкова[1,2]***, П.М. Готовцев***[2]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)

[2] НИЦ Курчатовский Институт, Отдел Биотехнологий и Биоэнергетики

В данной работе рассмотрены экспериментальные работы и существующие теории о механизмах миграции носителя заряда вдоль цепочки ДНК, произведен анализ параметров, от которых зависит проводимость биологической макромолекулы, предложена идея создания единой базы экспериментальных данных, чтобы в дальнейшем разработать собственную модель, удовлетворяющую экспериментальным измеренным значениям. Данная модель, как предполагается, будет базироваться на уже имеющихся теориях о классических и квантовых механизмах переноса заряда [2]:

$$\mathrm{H} = \mathrm{H_F} + \frac{1}{2}\sum_{\mathrm{n}} \alpha'_{\mathrm{n}} \left(\frac{\mathrm{p_{zn}^2}}{\mathrm{m_n}} + \mathrm{K_n z_n^2}\right) + \sum_{\mathrm{n}} \frac{\mathrm{e^2 \mu_n^2}}{6(4\pi\varepsilon_0)^2 \mathrm{k_B T (z_n^2 + u_n^2)^2}} + \sum_{\mathrm{n}} \mathrm{eEz}\delta(\mathrm{z - z_n}) + \mathrm{U_M}$$

$$H_F = H_{cl} + \langle\Psi|H_q|\Psi\rangle = \frac{1}{2}\sum_n \alpha'_n \left(\frac{p_n^2}{m_n} + K_n u_n^2\right) + \langle\Psi|H_q|\Psi\rangle \; [2]$$

$$H_q = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n |n\rangle\langle n| + \sum_{n\neq k} \nu_{nk} |n\rangle\langle k| + \sum_{n=1}^{N} \alpha'_n u_n |n\rangle\langle n|$$

$$U_M(z_n) = D_n(1 - e^{-a_n z_n})^2$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n b_n(\tilde{t})|n\rangle$$

где $b_n(\tilde{t})$- вероятность обнаружения заряда на n-м сайте, m_n- масса n-го сайта, K_n- константа упругости, α_n- энергия заряда на n-м сайте, α'_n- константа связи заряда со смещением n-го участка от положения равновесия, $U_M(z_n)$ - потенциал Морзе. В данной модели учтены не только старые подходы взаимодействия классических и квантовых систем, а также добавлены слагаемые, отвечающие за флуктуации осцилляторов в поперечном направлении z_n, влияние на систему внешнего приложенного электрического поля, нелинейные взаимодействия сайтов и заряд-дипольное взаимодействие.

Гамильтониан переписываем в вещественной форме, положив $b_n(\tilde{t}) = x_n(\tilde{t}) + iy_n(\tilde{t})$. Выбираем сопряженные переменные $(x_n, \hbar y_n)$ и $(u_n, p_n = M_n \dot{u}_n)$ с $(z_n, p_{zn} = M_n \dot{z}_n)$. Решаем следующую систему Гамильтона:

$$\begin{cases} \dot{x}_n = \dfrac{\partial H}{\partial(\hbar y_n)} \\ \dot{y}_n = -\dfrac{\partial H}{\partial(x_n)} \\ \dot{p}_n = -\dfrac{\partial H}{\partial(u_n)} \\ \dot{u}_n = \dfrac{\partial H}{\partial(p_n)} \\ \dot{p}_{zn} = -\dfrac{\partial H}{\partial(z_n)} \\ \dot{z}_n = \dfrac{\partial H}{\partial(p_{zn})} \end{cases}$$

С учетом приближения ближайших соседей, получаем следующую систему дифференциальных уравнений:

$$
\begin{cases}
\dot{x}_n = \frac{1}{\hbar}\Big((\alpha_n^0 + \alpha_n' u_n) y_n + \nu_{n,n-1} y_{n-1} + \nu_{n,n+1} y_{n+1}\Big) \\
\dot{y}_n = -\Big((\alpha_n^0 + \alpha_n' u_n) x_n + \nu_{n,n-1} x_{n-1} + \nu_{n,n+1} x_{n+1}\Big) \\
\dot{p}_n = -K_n u_n + \frac{4e^2 \mu_n^2 u_n}{6(4\pi\varepsilon_0)^2 k_B T (z_n^2 + u_n^2)^3} - \gamma_n \dot{u}_n - \alpha_n'(x_n^2 + y_n^2) \\
\dot{u}_n = \frac{p_n}{M_n} \\
\dot{p}_{zn} = -K_{zn} z_n + \frac{4e^2 \mu_n^2 z_n}{6(4\pi\varepsilon_0)^2 k_B T (z_n^2 + u_n^2)^3} - \gamma_n \dot{z}_n - eE - 2D_n a_n (1 - e^{-a_n z_n}) e^{-a_n z_n} \\
\dot{z}_n = \frac{p_{zn}}{M_n}
\end{cases}
$$

Полученные систему дифференциальных уравнений будем решать с применением метода Рунге-Кутты 4го порядка.

Литература

1. *Давыдов А.С.,* Биология и квантовая механика, Киев (1979)
2. *Фиалко Н.С.,* Моделирование переноса заряда в ДНК, Пущино (2007)