

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В МОЛЕКУЛЕ ДНК

Закирьянов Ф.К., Мельников В.Ю.

Башкирский государственный университет,
Россия, 450076, г. Уфа, 3. Валиди, 32, +7(347)229-96-45, farni@rambler.ru

В настоящее время известно много различных экспериментов по переносу заряда в ДНК, интерпретации которых посвящено большое число теоретических работ. В частности в работе [1] показано, что конформационные возмущения в виде бризеров, возбуждаемые в так называемой РВ-модели ДНК, *взаимодействуют* с зарядами. При этом характерная длина смещения связанного состояния "бризер-заряд" составила в этой модели около 20 сайтов.

Мы предлагаем рассмотреть динамику переноса заряда в Y-модели молекулы ДНК, отличающейся от РВ-модели тем, что изменение конформации происходит не за счет поперечного смещения нуклеотидов, а за счет их вращения вокруг сахаро-фосфатного остова. Начальное конформационное возмущение задаётся в виде солитонной пары "кинк-антикинк", центр которой приходится примерно на 50-й сайт молекулы ДНК (см. рис. 1). Основная плотность заряда находилась в пределах этого возмущения. После превращения пары "кинк-антикинк" в движущийся бризер информация о плотности заряда теряет смысл. Как видно из рис. 1, расстояние, которое проходит солитон, несущий в себе заряд, до его превращения в бризер, растёт с уменьшением коэффициента взаимодействия между конформационным возмущением и плотностью заряда χ , и может достигать величины порядка 80 сайтов.

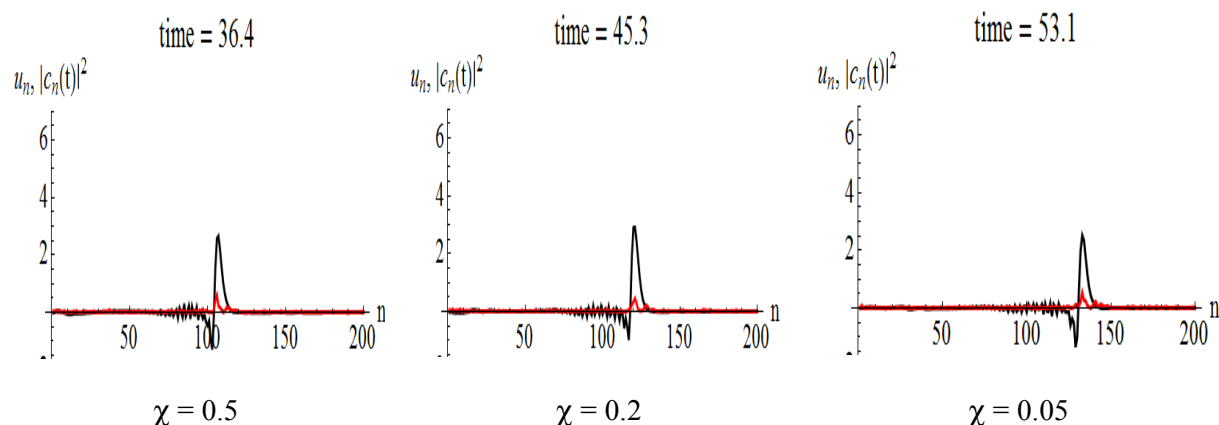


Рис. 1. Зависимость прохождения заряда от параметра χ .

Литература

1. Лахно В.Д., Четвериков А.П. Возбуждение бабблов и бризеров в ДНК и их взаимодействие с носителями заряда // Математическая биология и биоинформатика. 2014. Т. 9. № 1. С. 4–19.