

ИМПБ РАН 50 лет. Лаборатория квантово-механических систем

Лахно В.Д.

Институт математических проблем биологии РАН – филиал Института прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, 142290, Пушино, Московская обл., Россия

lak@impb.ru

50 Years of IMPB RAS. Laboratory of Quantum-Mechanical Systems

Lakhno V.D.

Institute of Mathematical Problems of Biology, Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences, Pushchino, Moscow Region, 142290, Russia

ЛКМС занимается изучением динамики электронных и дырочных возбуждений в биополимерах на основе "крупнозернистых" моделей, учитывающих различные потенциалы в полимерной цепочке, проведением вычислительных экспериментов по переносу заряда и сопоставлением полученных результатов с экспериментальными данными. Основной акцент в исследованиях сделан на молекулу ДНК, наиболее перспективную из биологических молекул с точки зрения ее использования в нанобиоэлектронике.

Основные результаты, полученные за последние два десятилетия:

- Предложен солитонный механизм переноса заряда в ДНК [1].
- Посторена квантово-классическая модель фотореакционного центра фотосинтеза [2].
- Рассчитана подвижность дырки в PolyG/PolyC фрагментах для температур от 10 до 400 К [3].
- Для PolyG/PolyC цепочки промоделировано спонтанное нарушение симметрии колебаний заряда в электрическом поле, приводящее к генерации блоховских осцилляций [4].
- Разработан комбинированный прыжково-суперобменный подход к моделированию скорости переноса заряда в гетерогенных полинуклеотидных цепочках, объясняющий широкую совокупность экспериментальных данных по константам скорости переноса в олигонуклеотидах [5].
- Доказана возможность равномерного движения солитона в электрическом поле. Показано, что в электрическом поле, превышающем критическое значение, солитон как целое совершает блоховские осцилляции [6].
- Предложены логические элементы на основе двухцепочечных дуплексов ДНК. Приведены структуры двухцепочечных олигонуклеотидов, осуществляющих функции булевой логики NOT, OR, AND, XOR [7].
- Показано, что в сильном электрическом поле солитонные осцилляции переходят в бризерные [8].
- Построена фазовая диаграмма существования биполярных состояний в PolyG/PolyC и PolyA/PolyT цепочках. Дана оценка температуры сверхпроводящего перехода в однородных полинуклеотидных цепочках [9].
- Рассчитана электронная теплоемкость для однородных polyA, polyG и polyT нуклеотидных фрагментов [10].
- Установлено, что метастабильная квазичастица «мобильный дискретный бризер + электрон» может перемещаться на дистанцию до 200 межпарных расстояний [11].
- Разработана модель первичной фотореакции родопсина [12].

Цикл работ по переносу заряда в биополимерах

был удостоен Премии А.Н. Крылова Российской академии наук 2016 г.

Список литературы

1. Fialko N.S., Lakhno V.D. Nonlinear dynamics of excitations in DNA. *Phys. Lett. A*. 2000. V. 278. P. 108–111.
2. Lakhno V.D. Oscillations in the primary charge separation in bacterial photosynthesis. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2002. V. 4. P. 2246–2250 doi: [10.1039/B102700J](https://doi.org/10.1039/B102700J)
3. Лахно В.Д., Фиалко Н.С. Подвижность дырок в однородной нуклеотидной цепочке. *Письма в ЖЭТФ*. 2003. Т. 78. № 5. С.786–788. doi: [10.1134/1.1625737](https://doi.org/10.1134/1.1625737)
4. Lakhno V.D., Fialko N.S. Bloch oscillations in a homogeneous nucleotide chain. *Pisma v ZhETF*. 2004. V. 79. № 10. P. 575–578. doi: [10.1134/1.1780553](https://doi.org/10.1134/1.1780553)
5. Lakhno V.D., Sultanov V.B., B.Montgomery Pettitt. Combined hopping-superexchange model of a hole

- transfer in DNA. *Chemical Physics Letters*. 2004. V. 400. № 1--3. P. 47–53. doi: [10.1016/j.cplett.2004.10.077](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2004.10.077)
6. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Bloch oscillations of a soliton in a molecular chain. *The European Physical Journal B*. 2007. V. 55. P. 85–87. doi: [10.1140/epjb/e2007-00045-3](https://doi.org/10.1140/epjb/e2007-00045-3)
 7. Lakhno V.D., Sultanov V.B. Baseline logical elements on the basis of DNA. *International Journal of Quantum Chemistry*. 2008. V. 108. № 11. P. 1913–1920. doi: [10.1002/qua.21690](https://doi.org/10.1002/qua.21690)
 8. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Electron motion in a Holstein molecular chain in an electric field. *Eur. Phys. J. B*. 2011. V. 79. P. 147–151. doi: [10.1140/epjb/e2010-10565-2](https://doi.org/10.1140/epjb/e2010-10565-2)
 9. Lakhno V.D., Sultanov V.B. Possibility of a (bi)polaron high-temperature superconductivity in Poly A/ Poly T DNA duplexes. *Journal of Applied Physics*. 2012. V. 112. № 6. P. 064701. doi: [10.1063/1.4752875](https://doi.org/10.1063/1.4752875)
 10. Fialko N.S., Sobolev E.V., Lakhno V.D. Temperature dependence of electronic heat capacity in Holstein model of DNA. *Physics Letters A*. 2016. V. 380. № 17. P. 1547–1550. doi: [10.1016/j.physleta.2016.02.045](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2016.02.045)
 11. Chetverikov A.P., Ebeling W., Lakhno V.D., and Velarde M.G. Discrete-breather-assisted charge transport along DNA-like molecular wires. *Physical Review E*. 2019. V. 100. Iss. 5. 052203. doi: [10.1103/PhysRevE.100.052203](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.052203)
 12. Shigaev A.S., Feldman T.B., Nadochenko V.A., Ostrovsky M.A., Lakhno V.D. Quantum-classical model of the rhodopsin retinal chromophore cis–trans photoisomerization with modified inter-subsystem coupling. *Computational and Theoretical Chemistry*. 2020. V. 1181. P. 112831. doi: [10.1016/j.comptc.2020.112831](https://doi.org/10.1016/j.comptc.2020.112831)