

Эволюция энергии электрона в процессах его захвата мобильным дискретным бризером в молекуле ДНК с закрепленными концами

Лахно В.Д.¹, Сергеев К.С.^{2, 1}, Четвериков А.П.^{2, 1}

¹ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

²Национальный исследовательский Саратовский государственный университет

chetverikovap@info.sgu.ru

Проведено численное моделирование захвата электрона мобильным дискретным бризером в молекуле ДНК с закрепленными концами в случае, когда значения матричных коэффициентов перескоков между сайтами являются положительными. Исследование выполнено на основе модели Пейрарда–Бишопа–Доксуа–Холстейна. Бризер возбуждался за счет возмущения скорости двух смежных нуклеотидных пар, расположенных около одного из концов молекулы. Показано, что возбужденный таким образом мобильный бризер в состоянии захватить дислоцированный поблизости внешний электрон и обеспечить его транспорт вдоль молекулы. Основное внимание в настоящей работе уделяется анализу эволюции энергии электрона. Установлено, что энергия электрона сначала падает в момент захвата, а потом осциллирует около среднего значения, которое медленно растет по мере разрушения бризера вследствие потерь энергии, затрачиваемой на возмущение молекулы при прохождении мобильного бризера.

Ключевые слова: ДНК, модель Пейрарда–Бишопа–Доксуа–Холстейна, мобильный бризер, захват и транспорт электрона.

Evolution of electron energy under trapping by mobile discrete breathers in DNA with fixed ends

Lakhno V.D.¹, Sergeev K.S.^{2, 1}, Chetverikov A.P.^{2, 1}

¹IMPB RAS – Branch of KIAM RAS

²National research Saratov state university

Simulation of trapping of electron by mobile discrete breather in the DNA with fixed ends for a case with positive coefficients of hopping integrals has been performed. The Peyrard–Bishop–Dauxois–Holstein model has been used to study excitation of breather by imposing appropriate disturbances to velocities of two adjacent nucleotide pairs placed near an end of anchored molecular wire. It is shown that a formed mobile breather is able to trap an external electron placed in the disturbed region of molecule and provide its transport along molecule. Evolution of energy of electron is analyzed based on data of simulations. It is found that energy of electron falls in the moment of trapping, then oscillates near an averaged value which slowly grows because slow degradation of breather. Breather spreads because of losses of energy expended on excitation of molecule for translational motion of mobile breather.

Key words: DNA, Peyrard–Bishop–Dauxois–Holstain model, mobile breather, trapping and transport of electron.

1. Введение

Известно, что молекулы типа ДНК рассматриваются в качестве одного из базовых элементов нано-био-электроники [1–5]. В последнее время исследования ДНК, касающиеся ее

применения в этом качестве, активно развиваются [6]. Исследования фокусируются на выявлении особенностей механизмов взаимодействия электронов с молекулой ДНК [6–8], расчетах вольт-амперных характеристик [9–10], выяснении возможностей управления процессом переноса зарядов [11], анализе различных перспективных

схем организации транспорта заряженных частиц [12]. Одним из возможных механизмов транспорта заряженной частицы (электрона) вдоль молекулы ДНК является захват заряженной частицы в потенциальную яму сформированного тем или иным способом мобильного дискретного бризера [1–14]. Преимуществом такого механизма является отсутствие электрического поля, тянущего заряженную частицу вдоль оси молекулы. В процессе захвата и транспорта электрона мобильным дискретным бризером (МДБ) происходит преобразование энергии электрона, от особенностей которого зависит эффективность проводимости молекулы [13, 14]. Это связано с тем, что образующаяся квазичастица «МДБ + электрон» является метастабильной и имеет конечное время жизни. Поэтому и длина траектории, вдоль которой движется квазичастица, также конечная. Поскольку длина траектории определяет длину, на которую можно переместить электрон, то важно понять какие причины ограничивают длину траектории. Полезную информацию для выяснения механизма разрушения связанного состояния электрона и локализованной волны в решетке можно извлечь из данных об изменении энергии электрона в процессе его перемещения вдоль молекулы. В настоящей работе исследуется взаимодействие электрона с мобильным бризером в молекуле ДНК с закрепленными концами, причем рассматривается модель с положительными матричными элементами перескока между сайтами. Изучается захват электрона, находящегося вначале в состоянии с низкой энергией, мобильным бризером, возбужденным идентичными возмущениями скорости двух нуклеотидных пар, дислоцированных около одного из концов молекулы.

2. Математическая модель Пейрарда–Бишопа–Доксуа–Холстейна (ПБДХ) для молекулы ДНК с зафиксированными концами

Мы используем стандартную модель ПБДХ, в которой эволюция возмущений в цепочке нуклеотидных пар описывается классическими уравнениями движения под действием всех учитываемых в рассматриваемой задаче сил, важных для данного механизма транспорта, но динамика электрона рассматривается как эволюция волновой функции частицы, связанной с цепочкой нуклеотидов [13–17]. Уравнения модели выглядят следующим образом:

$$\ddot{q}_n + \Gamma \dot{q}_n = e^{-q_n} (e^{-q_n} - 1) - \omega_{\text{bond}}^2 \left\{ \frac{\partial W(q_{n,n-1})}{\partial q_n} + \frac{\partial W(q_{n,n+1})}{\partial q_n} \right\} + \chi_n |c_n|^2, \quad (1)$$

$$\dot{c}_n = i\tau_e (c_{n+1} + c_{n-1}) + i\chi_{\text{el}} q_n c_n, \quad (2)$$

$$W(q_{n,k}) = \frac{1}{2} (q_n - q_k)^2 \left[1 + \rho e^{-\kappa(q_n + q_k)} \right]. \quad (3)$$

Здесь q_n – безразмерное смещение частицы от положения равновесия, ω_{bond} – безразмерная частота колебаний сайтов относительно друг друга, Γ – коэффициент трения, c_n – компонент дискретной волновой функции электрона, χ_n и χ_{el} – параметры связи электрона с молекулой ДНК, параметры ρ , κ и функция W характеризуют функцию связи нуклеотидных пар [1, 13, 14].

Уравнениям (1)–(3) соответствует выражение для энергии электрона:

$$E_{\text{el}} = -\tau_e \sum_n (c_n^* (c_{n-1} + c_{n+1})) - \chi_{\text{el}} \sum_n q_n |c_n|^2. \quad (4)$$

Первая и последняя нуклеотидные пары считаются закрепленными, т.е. их смещения и их скорости тождественно равны нулю. Особенностью рассматриваемой в данной работе модели является положительный знак перед коэффициентом τ_e в дискретном уравнении для волновой функции электрона (2), в отличие от исследуемых ранее моделей. В этом случае состояние электрона с синфазными компонентами волновой функции при отсутствии в начальный момент времени $t = 0$ возмущений координат частиц нуклеотидных пар в начальный момент времени является состоянием с низкой энергией $E_{\text{el}}^0 < 0$, близкой к минимальному значению безразмерной энергии $E_{\text{el}}^0 = -2\tau_e$, где $\tau_e = v / \hbar\omega_M$ – безразмерный параметр, определяющий отношение характерных масштабов эволюции возмущений в решетке и эволюции волновой функции.

При численном моделировании полагалось, что возмущены начальные скорости двух крайних частиц, причем возмущения могли быть как отрицательными (частицы получали начальный импульс, направленный к оси молекулы), так и положительными (частицы получали начальный импульс, направленный от оси молекулы). Волновая функция электрона представлялась вначале равномерно распределенной в некотором кластере частиц, с синфазными компонентами, и размещенной слегка впереди области возмущения молекулы. Уравнения (1)–(3) решались численно, в процессе моделирования рассчитывалась энергия электрона (4).

3. Захват электрона и транспорт его мобильным бризером: энергетический аспект

На рисунке 1 представлены эволюции смещений частиц (а), волновой функции электрона (б) и энергия электрона, как функция времени (в), для значений параметров модели, при которых реализуется эффективное формирование мобильного бризера, эффективный захват и транспорт электрона этим бризером на очень большую длину, составляющую 100 и более межпарных расстояний.

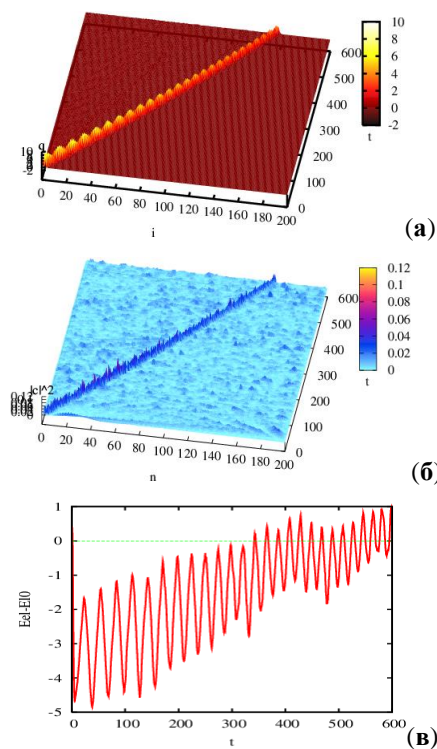


Рис. 1. Возбуждение мобильного бризера и захват им электрона в ДНК с закрепленными концами: **а)** эволюция смещений $q_n(t)$; **б)** эволюция компонентов функции распределения вероятности для электрона $|c_n|^2(t)$; **в)** изменение энергии электрона во времени. $N = 200$, $v_2 = v_3 = -4$, $\omega_{\text{bond}} = 0.4$, $\tau_e = 18$, $\chi_h \approx -0.5$, $\chi_{el} \approx -8.5$, $\rho = 0.5$, $\alpha = 0.08$, $\Gamma = 0.001$.

Из рисунка 1,а следует, что мобильный бризер с большим временем жизни может быть сформирован за счет возмущения скорости всего лишь двух смежных частиц на закрепленном конце молекулы. Этот бризер успешно захватывает неподвижный электрон и перемещает его с собой, образуя заряженную квази-частицу «МДБ-электрон». Энергия электрона, которая вначале близка к минимуму для невозмущенной решетки, падает в момент захвата. Затем энергия электрона осциллирует в потенциальной яме бризера с уменьшающейся амплитудой колебаний, что можно трактовать как переход на нижние энергетические уровни относительно дна ямы. Однако одновременно среднее значение энергии медленно растет, поскольку плотность бризера постепенно уменьшается, и он все более расплывается. Причиной являются потери энергии бризером на возбуждение слабых колебаний в цепочке нуклеотидов после прохождения дискретного бризера. Дело в том, что возбужденная бризероподобная волна на самом деле является метастабильным состоянием с длительным временем жизни. Рано или поздно бризер разрушается, однако в настоящей работе процесс разрушения бризера не обсуждается, поскольку он теряет электрон даже раньше того, как разрушится, т.е. еще, когда потенциальная яма становится недостаточно глубокой, чтобы удерживать электрон.

Однако, как показывают результаты моделирования, существуют комплексы значений параметров, при которых процесс излучения энергии бризером в решетку идет достаточно медленно, и время жизни и длина траектории квази-частицы достаточно большие, более 100 межпарных расстояний.

Аналогичные эффекты наблюдаются, если две частицы получают вначале импульсы, направленные от оси молекулы. Варьирование значений начальных импульсов, как положительных, так и отрицательных, показали, что важную роль играет энергия начального возбуждения. Максимальная длина перемещения электрона реализуется в узком интервале значений начальной энергии, хотя достичь умеренных значений длины перемещения можно в относительно широком интервале значений начальной энергии

4. Благодарности

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 16-11-10163.

5. Список литературы

1. Chetverikov A.P., Ebeling W., Lakhno V.D., Shigaev A.S., Velarde M.G. *Eur. Phys. JB*. 2016. V. 89. P. 101111.
2. *Nanobioelectronics – for Electronics, Biology and Medicine*. Eds.: Offenhausser A., Rinaldi R. New York: Springer, 2009. 337 p.
3. Chakraborty T. *Charge Migration in DNA, Nano Science and Technology*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2007.
4. Yakushevich L.I. *Nonlinear Physics of DNA*. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2005. Wiley Series in Nonlinear Science.
5. Conwell E.M., Rakhmanova S.V. *PNAS*. 2000. V. 97. P. 4556.
6. Li G., Govind N., Ratner M.A., Cramer C.J., Gagliardi L. *J. of Physical Chemistry Letters*. 2015. V. 6. P. 4889–4897
7. Yoo-Konga S., Liewriana W. *Eur. Phys. J. E*. 2015. P. 1–14.
8. Xiang L., Palma J.L., Bruot C., Mujica V., Ratner M.A., Tao N. *Nature Chemistry*. 2015. P. 221–226.
9. Zhang Y., Zhu W.-H., Ding G.-H., Dong B., Wang X.F. *Nanotechnology*. 2015. P. 1–14.
10. De Moura F.A.B.F., Lyra M.L., de Almeida M.L., Ourique G.S., Fulco U.L., Albuquerque E.L. *Physics Letters A*. 2016. V. 380. № 42. P. 3559–3563.
11. Artes J.M., Li Y., Qi J., Anantram M.P., Hihath J. *Nature Communications*. 2015. P. 1–8.
12. De Almeida M.L., Ourique G.S., Fulco U.L., Albuquerque E.L., de Moura F.A.B.F., Lyra M.L. *Chemical Physics*. 2016. P. 1–10.

13. Четвериков А.П., Сергеев К.С., Лахно В.Д. *Мат. биол. и биоинф.* 2017. Т. 12. № 2. С. 375–384.
14. Chetverikov A.P., Sergeev K.S., Lakhno V.D. *Mathematical Biology and Bioinformatics* 2018. V. 13. № S. P. t59–t69.
15. Fuentes M.A., Maniadis P., Kalosakas G., Rasmussen K.Ø., Bishop A.R., Kenkre V.M., Gaididei Yu.B. *Phys. Rev. E.* 2004. V. 70. P. 025601.
16. Grinevich A.A., Yakushevich L.V. *Journal of Theoretical Biology.* 2018. V. 453. P. 68–77.
17. Lima R.P.A., Malyshev A.V. Charge migration mechanisms in the DNA at finite temperature revisited; from quasi-ballistic to subdiffusive transport. *Cornell University Library.* URL: <https://arxiv.org/abs/1803.06648v1> (дата обращения: 20.08.2018).