

## **СПЕЦИАЛИЗИРОВАННАЯ БАЗА ДАННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОВОДИМОСТИ В ДНК**

**Парамонова Е.В., Фиалко Н.С.**

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт математических проблем биологии Российской академии наук,  
РФ, 142290, Московская обл. г.Пушино, ул.Институтская д.4, ИМПБ РАН  
fialka@impb.psn.ru

Исследование переноса заряда в ДНК – сравнительно новая, быстро развивающаяся область. Эксперименты по переносу заряда в нуклеотидных фрагментах начаты в 1993 году, первые результаты по численному моделированию динамики переноса относятся к 2000 году. Экспериментально установлено, что в зависимости от параметров (вида нуклеотидной последовательности, параметров окружающего раствора и т.д.) скорость переноса заряда может меняться на много порядков. Особую актуальность задача исследования процессов переноса приобрела в связи с потенциальной возможностью использования ДНК в качестве нанопроводов.

В ИМПБ РАН в течение ряда лет ведутся работы по моделированию переноса заряда в ДНК, цель которых - выяснение функциональных параметров, определяющих скорость электронного переноса в биополимерах, в частности, величины подвижности заряда в зависимости от нуклеотидной последовательности фрагмента, температуры окружающей среды и т.д. В результате проведения вычислительных экспериментов накоплен большой массив данных. Для его систематизации и дальнейшей обработки на основе разработанных ранее сотрудником ИМПБ В.В.Сычевым программ создана база данных. В ней содержатся использованные при расчете значения параметров модели (интегралы перекрытия, энергия электрона на сайте, характерные частоты и дисперсия классической цепочки сайтов, коэффициент сольватации, температура термостата и т.д.), результаты проведенных вычислительных экспериментов для фрагментов ДНК различной длины и состава и рассчитанная величина коэффициента подвижности заряда в полинуклеотиде такого типа. Реализована визуализация результатов, графики строятся в двух режимах – динамика распространения зарядовой плотности по цепочке и изменение вероятности по времени на отдельных сайтах.

Созданная база данных может использоваться для выбора проводников с характеристиками, наиболее близкими к заданным. В дальнейшем результаты могут быть применены для решения обратной задачи – идентификации фрагмента ДНК по времени прохождения заряда.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты 11-07-00635, 10-07-00112.