

**И. В. Семченко, А. Л. Самофалов, Е. Д. Пискунова,
П. В. Клименко**

УО «Гомельский государственный университет
имени Франциска Скорины», Гомель, Беларусь

ПОСТРОЕНИЕ ЭКВИВАЛЕНТНОЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СХЕМЫ ДЛЯ ДВОЙНОЙ СПИРАЛИ МОЛЕКУЛЫ ДНК КАК НАНОРАЗМЕРНОГО ПРОВОДНИКА

Введение

Электропроводность молекулы ДНК и её механизмы постоянно привлекают внимание исследователей, но в настоящее время изучены ещё не полностью [1–5]. Водяная оболочка, в которой находится реальная молекула ДНК, может влиять на её электропроводность. Кроме того, в молекуле ДНК может возникать не только ток проводимости, но и поляризационный ток. Выявление механизмов проводимости молекулы ДНК и их деталей остаётся все ещё не до конца решённой задачей. В практическом плане, электропроводность ДНК создаёт интересные перспективы при возможном использовании ДНК в качестве молекулярного нанопроводника. В наноразмерной электронике могут быть разработаны интегральные схемы нового поколения, использующие молекулу ДНК как элемент наноустройств. При этом актуальным является исследование распределения электрического тока вдоль двойной спирали и вычисление длины сегмента молекулы, который может быть активирован при возбуждении тока.

Анализ электрических токов в двойной спирали ДНК важен также в плане исследования равновесия молекулы и опасности её повреждений [6].

1. Постановка задачи исследования

Необходимо исследовать распределение электрического тока вдоль двойной спирали при различных механизмах возбуждения этого тока. Для этого необходимо провести расчёт и построение эквивалентной электрической схемы для двойной спирали молекулы ДНК с

учётом электрического сопротивления нуклеотидов и водородных связей между азотистыми основаниями. При этом используются результаты эксперимента, приведённые в статье [1].

Чтобы повысить наглядность результатов, в программе Blender спроектирована 3D модель двойной спирали молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК), которая показана на рисунке 1.



Рисунок 1 – 3D модель двойной спирали молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК), спроектированная в программе Blender

В работе [1] изучены основы переноса заряда в монослое ДНК на золотой поверхности и исследованы 17 пар азотистых оснований в отдельных точках с помощью редокс датчика (рисунок 2). Исследования проводились с помощью циклической и прямоугольной вольтамперометрии. Таким образом, были измерены микротоки в 5-ти точках двойной спирали молекулы ДНК.

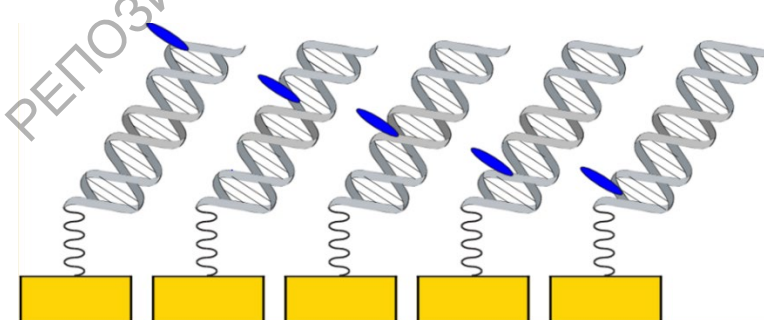


Рисунок 2 – Исследование переноса заряда в монослое молекулы ДНК [1]

Редокс датчик имел пять возможных точек присоединения к ДНК, чтобы зондировать зависимость тока от расстояния без изменения промежуточной последовательности нуклеотидов. Были исследованы

пары нуклеотидов с номерами 17, 13, 9, 4 и 1 (положения датчика показаны на рисунке 2 слева направо).

Нами предложена электрическая эквивалентная схема молекулы ДНК, которая в первом приближении описывает перенос носителей заряда вдоль двойной спирали (рисунок 3). Здесь R_{\parallel} – эффективное электрическое сопротивление, усреднённое для всех нуклеотидов, R_{\perp} – эффективное усреднённое электрическое сопротивление водородной связи между нуклеотидами, образующими пары.

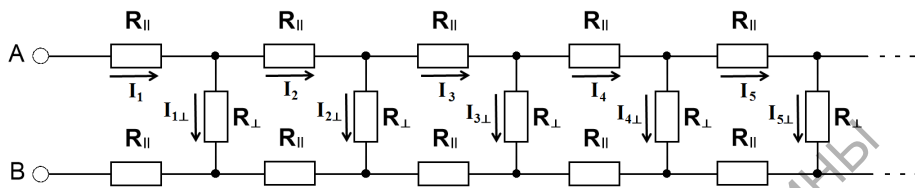


Рисунок 3 – Упрощенный вариант эквивалентной электрической схемы молекулы ДНК как наноразмерного проводника. Электрическое напряжение приложено между двумя нитями двойной спирали (между точками А и В)

В применении к молекуле ДНК можно рассматривать такую цепь как бесконечную. В рамках такого приближения все звенья, начиная со второго, могут быть заменены эффективным сопротивлением, равным полному сопротивлению всей цепи между точками А и В [7]. Тогда полное сопротивление двойной спирали можно определить по формуле [7]

$$R_{AB} = R_{\parallel} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{2R_{\perp}}{R_{\parallel}}} \right). \quad (1)$$

Как следует из экспериментов, в ДНК происходит преимущественный перенос электрического заряда вдоль одной и той же спиральной нити [2–5]. Следовательно, выполняется неравенство $2R_{\perp} \gg R_{\parallel}$, при котором формула (1) приобретает вид $R_{AB} \approx \sqrt{2R_{\parallel}R_{\perp}}$. Тогда можно получить выражения для силы тока в одной нити в нуклеотиде с номером k (при $k=2, 3, 4, \dots$)

$$I_1 = \frac{U_{AB}}{\sqrt{2R_{\parallel}R_{\perp}}}, \quad I_k = I_1 \left(1 - (k-1) \sqrt{\frac{2R_{\parallel}}{R_{\perp}}} \right). \quad (2)$$

Аналогично, сила тока в водородной связи между двумя нитями в паре нуклеотидов с номером k равна

$$I_{1\perp} = I_1 \cdot \sqrt{\frac{2R_{\parallel}}{R_{\perp}}}, \quad I_{k\perp} = I_1 \cdot \sqrt{\frac{2R_{\parallel}}{R_{\perp}}} \left(1 - k \sqrt{\frac{2R_{\parallel}}{R_{\perp}}}\right) \approx I_{1\perp}. \quad (3)$$

Эта сила тока практически не зависит от номера нуклеотида k .

Значения силы тока I_k , $I_{k\perp}$ на различных участках двойной спирали ДНК могут быть получены экспериментально с помощью методик, описанных в работах [1–5]. Формулы (1–3), при их совместном использовании с измеренными токами, позволяют вычислить эффективные электрические сопротивления различных участков молекулы ДНК. Полученные результаты могут быть полезны при проектировании устройств, содержащих молекулу ДНК в качестве нанопроводника.

Заключение

В работе предложена упрощённая электрическая схема молекулы ДНК как наноразмерного проводника, которая в первом приближении описывает перенос носителей заряда вдоль двойной спирали. Введено эффективное электрическое сопротивление, усреднённое для всех нуклеотидов, а также эффективное усреднённое электрическое сопротивление водородной связи между нуклеотидами, образующими пары. Получены выражения для полного сопротивления двойной спирали и для силы тока на различных участках ДНК, если электрическое напряжение приложено между двумя нитями. Результаты могут быть использованы в нанoeлектронике при проектировании интегральных схем нового поколения.

Литература

1. Wohlgamuth, Chris H. DNA as a Molecular Wire: Distance and Sequence Dependence / Chris H. Wohlgamuth, Marc A. McWilliams, Jason D. Slinker // *Analytical Chemistry*. – 2013. – Vol. 85. – P. 8634–8640.
2. Kelley, S. O. Electron transfer between bases in double helical DNA / S. O. Kelley, J. K. Barton // *Science*. – 1999. – Vol. 283. – P. 375–381.
3. Genereux, J. C. DNA-mediated Charge Transport in Redox Sensing and Signaling / J. C. Genereux, A. K. Boal, J. K. Barton // *Journal of American Chemical Society*. – 2010. – Vol. 132. – P. 891–905.

4. Genereux, J. C. Single-step Charge Transport through DNA over Long Distances / J. C. Genereux, S. M. Wuerth, J. K. Barton // Journal of American Chemical Society. – 2011. – Vol. 133. – P. 3863–3868.

5. Direct Measurement of the Dynamics of Hole Hopping in Extended DNA G-Tracts. An Unbiased Random Walk / S. M. Mickley Conron [et al.] // Journal of American Chemical Society. – 2010. – Vol. 132. – P. 14388–14390.

6. Semchenko, I. V. Optical Forces Acting on a Double DNA-Like Helix, Its Unwinding and Strands Rupture / I. V. Semchenko [et al.] // Photonics. – 2020. – Vol. 7, № 83, doi:10.3390/photonics7040083.

7. Иродов, И. Е. Задачи по общей физике / И. Е. Иродов // М.: Наука, 1988. – 416 с.