

ПЕРЕНОС ЗАРЯДА И КВАНТОВОЙ ИНФОРМАЦИИ В ДНК ПРИ ДЕЙСТВИИ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

А.В. Чижов¹, Д. Чевизович², С.Э. Ширмовский³

¹Лаборатория радиационной биологии, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²Институт ядерных наук «Винча», Белград, Сербия

³Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия
e-mail: chizhov@jinr.ru

Резюме. В работе проведено описание процессов переноса заряда в биомолекулах, таких как ДНК, а также в белках и РНК, возникающих при действии ионизирующих излучений. Исследование выполнено на основе поляронного подхода и уравнения Шрёдингера с диссипативной правой частью. Проанализирована природа динамики поляронных состояний заряженной частицы, мигрирующей по цепи ДНК. Исследованы квантовые корреляции между структурными элементами макромолекулярной цепи с учетом её основных системных параметров и влияния температуры окружения.

Ключевые слова: биомолекулы, полярон, квантовые корреляции

TRANSFER OF CHARGE AND QUANTUM INFORMATION IN DNA UNDER THE ACTION OF IONIZING RADIATION

A.V. Chizhov¹, D. Chevizovich², S.Eh. Shirmovsky³

¹Laboratory of Radiation Biology, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

²Vinča Institute for Nuclear Sciences, Belgrade, Serbia

³Far-East Federal University, Vladivostok, Russia
e-mail: chizhov@jinr.ru

Summary. The paper describes the processes of charge transfer in biomolecules, such as DNA, as well as in proteins and RNA, arising from the action of ionizing radiation. The study was carried out on the basis of the polar approach and the Schrödinger equation with a dissipative right-hand side. The nature of the dynamics of polaronic states of a charged particle migrating along the DNA chain, is analyzed. Quantum correlations between the structural elements of a macromolecular chain are investigated, taking into account its main system parameters and the influence of ambient temperature.

Key words: biomolecules, polaron, quantum correlations

Учёт процессов переноса заряда и энергии в ДНК, а также в РНК и белках, является важным при рассмотрении эффектов воздействия ионизирующих излучений на живые организмы. Миграция заряда в ДНК напрямую связана с её повреждением, что может снизить точность репликации молекулы ДНК и, следовательно, может стать источником геномных мутаций. Кроме того, биомолекулы являются ресурсом нанобиотехнологий, обеспечивая миниатюризацию микроэлектронных устройств. Молекулы ДНК и различные биополимеры являются перспективными биоструктурами для записи и хранения информации, что важно для создания молекулярных и квантовых компьютеров.

Целью работы явилось изучение динамики переноса заряда и энергии в биомолекулах на квантово-механическом уровне и возникающих при этом квантовых

корреляций между структурными элементами макромолекулярной цепи с учетом её основных системных параметров и влияния температуры окружения.

Для описания транспортных процессов в биомолекулах в работе предложено два подхода. Первый – это квантово-механический подход, основанный на концепции поляронных состояний как результат взаимодействия зарядовых или вибронных состояний молекулярной цепочки с её деформационными возбуждениями [1]. Благодаря такому взаимодействию заряда с фононами может происходить самозахват заряда и возникает эффект полярона. Такие квазичастицы могут распространяться на большие расстояния в солитонной форме с минимальными потерями энергии. Влияние температуры окружения на транспортные процессы учитывался в рамках приближения среднего поля.

Для исследования переноса заряда в ДНК использовался так же квантово-механический подход, основанный на уравнении Шрёдингера с диссипативной правой частью. Подход развит на основе геликоидальной модели Пейрарда–Бишопа. В этом случае заряд рассматривается как квантовая квазичастица, которая подчиняется квантовой динамике. ДНК представляется как классический объект, подчиняющийся уравнениям Гамильтона [2].

Описание процессов переноса в высокомолекулярных структурах на квантово-механическом уровне дало возможность исследовать возникающие в таких системах квантовые корреляции [3,4]. Так, в частности, в работе [4] было показано, что скорость миграции запутанного состояния в микротрубочке клетки сравнима со скоростью передачи нервных импульсов. Кроме того, в настоящее время считается, что квантовые корреляции и запутанность между электронными состояниями нуклеиновых кислот в ДНК могут быть ответственны за процессы её репарации и репликации. Для описания таких корреляций в работе применяются методы, основанные на квантовых корреляционных функциях, а также на мере запутанности в виде логарифмической отрицательности

Список литературы:

- [1] D. Chevizovich, S. Zdravkovic, A.V. Chizhov, Z. Ivic. Chinese Physics B. 2023. V. 32. № 1. P. 010506-11.
- [2] S. Eh. Shirmovsky. Biophys. Chem. 2016. V. 217, P. 42–57.
- [3] AV. Chizhov. Quantum Correlation Effects in Biopolymer Structures. In: Nonlinear Dynamics of Nanobiophysics (Editors: S. Zdravkovic, D. Chevizovich). 2022. Singapore: Springer Nature Singapore Pte Ltd. Chapter 9. P. 233-262.
- [4] S.Eh. Shirmovsky, A.V. Chizhov. BioSystems. 2023. V. 231. P. 104967.