

УДК 537.876:621.3

DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2025_1_62_51
EDN: CJVZWE

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДНК-ПОДОБНОЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ЦЕПИ И ВЫЧИСЛЕНИЕ УСРЕДНЕННЫХ АКТИВНЫХ СОПРОТИВЛЕНИЙ И ЕМКОСТЕЙ НУКЛЕОТИДОВ И ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ

И.В. Семченко¹, Е.Д. Пискунова², А.Л. Самофалов², П.В. Сомов²

¹ГНПО «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника», Минск

²Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

MODELLING OF DNA-LIKE ELECTRICAL CIRCUIT AND CALCULATION OF THE AVERAGE ACTIVE RESISTANCES AND CAPACITANCES OF NUCLEOTIDES AND HYDROGEN BONDS

I.V. Semchenko¹, E.D. Piskunova², A.L. Samofalov², P.V. Somov²

²SSPA "Optics, Optoelectronics and Laser Technology", Minsk

²Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. Проведен расчет усредненных активных сопротивлений и емкостей нуклеотидов и водородных связей в молекуле ДНК на основе сравнения теоретической модели с известными экспериментальными данными. Для исследования токов и напряжений на различных участках эквивалентной электрической схемы молекулы ДНК спроектирована цепь, аналогичная структуре молекулы ДНК в плане электропроводности. Показано, что для сегментов ДНК, состоящих из ста пятидесяти и более пар нуклеотидов, может быть применена модель бесконечной электрической цепи с повторяющимися звеньями.

Ключевые слова: молекула ДНК, нуклеотиды, водородные связи, электрическая цепь, электрическое сопротивление, электроемкость.

Для цитирования: Моделирование ДНК-подобной электрической цепи и вычисление усредненных активных сопротивлений и емкостей нуклеотидов и водородных связей / И.В. Семченко, Е.Д. Пискунова, А.Л. Самофалов, П.В. Сомов // Проблемы физики, математики и техники. – 2025. – № 1 (62). – С. 51–57. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2025_1_62_51. – EDN: CJVZWE

Abstract. The average active resistances and capacitances of nucleotides and hydrogen bonds in the DNA molecule were calculated based on the comparison of the theoretical model with known experimental data. A circuit similar to the structure of the DNA molecule in terms of electrical conductivity was designed to study the currents and voltages at different parts of the equivalent electrical circuit of the DNA molecule. It is shown that for DNA segments consisting of one hundred fifty or more pairs of nucleotides, the model of an infinite electrical circuit with repeating links can be applied.

Keywords: DNA molecule, nucleotides, hydrogen bonds, electric circuit, electrical resistance, electrical capacity.

For citation: Modelling of DNA-like electrical circuit and calculation of the average active resistances and capacitances of nucleotides and hydrogen bonds / I.V. Semchenko, E.D. Piskunova, A.L. Samofalov, P.V. Somov // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2025. – № 1 (62). – P. 51–57. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2025_1_62_51 (in Russian). – EDN: CJVZWE

Введение

Молекула ДНК представляет интерес не только в качестве хранителя генетической информации, но и как наноразмерный элемент электрических цепей нового поколения. Из результатов экспериментов следует, что водородные связи между парами оснований передают электрические импульсы, но не пропускают постоянный ток между ними, что является типичным свойством электрических конденсаторов. Следовательно, структуру ДНК можно смоделировать как схему, состоящую из цепей, содержащих эффективные резисторы и конденсаторы. В работе предложена эквивалентная электрическая схема молекулы ДНК как наноразмерного

проводника, которая в первом приближении описывает перенос носителей заряда вдоль двойной спирали. В настоящее время не сделан четкий вывод об электрической проводимости молекулы ДНК, поскольку она проявляет очень разные проводящие свойства в различных условиях, подобно изолятору, проводнику или полупроводнику. Поэтому в статье используется модель ДНК-подобной спирали как электрического проводника, которая может послужить основой для дальнейших более углубленных исследований и сравнения с экспериментальными данными.

1 Теоретические сведения

В настоящее время функциональные нанопроводники и наноэлектроника весьма востребованы для применения в интегральных схемах следующего поколения, но использование большинства наноразмерных устройств в больших масштабах ограничивается рядом проблем. ДНК обладает большим потенциалом для применения в качестве молекулярного наноразмерного проводника благодаря хорошему качеству синтеза, высокой степени очистки, близкой к единице, и наноразмерной самоорганизации. Тем не менее, отсутствует полное понимание процесса переноса заряда в основном состоянии (В-форма) молекулы ДНК для электронных конфигураций в биологически подходящих условиях, где сохраняется полностью парная двуспиральная структура.

Экспериментальная часть работы [1], с результатами которой ведется сравнение в данной статье, заключается в следующем: были проведены исследования процесса переноса заряда в двуцепочечных монослоях ДНК, помещенных на золотой подложке. С помощью окислительно-активного зонда измерялась сила тока в различных парах азотистых оснований (в том числе в первой и семнадцатой паре) для одной и той же молекулы ДНК, то есть при неизменной последовательности нуклеотидов. Эксперимент проходил в строго контролируемых температурных условиях. Измерения выполнялись при помощи циклической и прямоугольной вольтамперометрии. Полученные результаты использовались для оценки скорости переноса заряда и подвижности носителей. Установлено, что скорость переноса заряда зависит от температуры и имеет обратную зависимость от расстояния, что согласуется со скачкообразным механизмом переноса. Эти результаты устанавливают основные факторы скорости передачи заряда и подвижности носителей в молекулярных ДНК-проводниках, определяя их последующие применения для наноразмерной электроники [1].

В статье [1] молекула ДНК рассматривается как нелинейный полупроводник с прыжковым механизмом переноса заряда. Установлено, что энергия активации переноса заряда в таком полупроводнике зависит от длины рассматриваемого сегмента, что не характерно для обычных полупроводников. Энергия активации принимает значения от 74 до 144 миллиэлектронвольт, при этом она зависит от длины исследуемого сегмента немонотонным образом, сначала увеличиваясь для пар оснований с номерами 4, 9 и 13, а затем уменьшаясь для пары оснований с номером 17. Такая немонотонная зависимость энергии активации переноса заряда требует дополнительного обоснования.

В статье [1] делается вывод, что полученные экспериментальные результаты больше соответствуют модели прыжкового механизма пе-

реноса заряда, чем модели туннельного переноса заряда. Хотя подробное исследование проводимости в зависимости от частоты тока не проводилось, в статье [1] отмечено, что при вольтамперометрии с использованием прямоугольных импульсов результат очень чувствителен к выбору частоты импульсов, которая была равна 40 Гц. Для циклической вольтамперометрии с эффективной частотой 0,05 Гц максимальная измеренная сила тока существенно отличалась, приблизительно в 77 раз, по сравнению с квадратно-волновой вольтамперометрией. Однако хорошо известно, что для прыжкового механизма переноса заряда, которому в статье [1] отдаётся предпочтение, в низкочастотном пределе проводимость полупроводника не зависит от частоты [2]–[4]. Указанные обстоятельства приводят к необходимости разработки новых, дополнительных моделей электропроводности ДНК, в том числе с учётом активных сопротивлений и емкостей нуклеотидов и водородных связей.

Молекула ДНК может быть охарактеризована колебательным контуром, состоящим из блоков, где каждая пара оснований и водородная связь обладают активным сопротивлением и емкостью. Такая схема объясняет перенос заряда в ДНК как на малые, так и на большие расстояния в хорошем согласии с экспериментальными данными, которые привели к идентификации так называемых механизмов суперобмена и многоступенчатого перехода. Однако, в отличие от случайных скачкообразных событий и суперобмена, схема отражает четко определенный механизм переноса заряда, подтверждающий большую надежность генетического вещества в доставке электронов [5]. Проводящие свойства молекулы ДНК представляют интерес не только в связи с возможными использованиями макромолекулы в наноструктурах, но и в плане анализа вредных факторов, которые могут привести к повреждению ДНК. Поэтому электропроводность молекулы ДНК и ее механизмы продолжают привлекать внимание исследователей [6]–[25], но они еще не полностью изучены. Водяная оболочка, в которой находится молекула ДНК, может привести к возрастанию электропроводности макромолекулы. Электропроводящие свойства молекулы ДНК должны быть тщательно изучены и учтены, наряду с другими физическими свойствами, в связи с перспективой использования ДНК в качестве элемента наноразмерных устройств. Наличие проводящих свойств молекулы ДНК было предсказано на основании теоретических исследований в работе [26]. Затем в статье [27] была рассмотрена роль переноса заряда в биохимических процессах клетки, таких как репликация, транскрипция и репарация ДНК. Информация об открытии быстрого переноса заряда между донором и акцептором в молекуле ДНК была опубликована в работе [28]. В результате

возникла нанобиоэлектроника как новое направление исследований, которое представляет собой совершенствование молекулярной электроники и использует ДНК, с учетом ее проводящих свойств, в новых микроэлектронных устройствах [29]–[31]. В случае биомолекул, включая ДНК, с целью анализа проблемы переноса заряда могут быть использованы различные модели и взаимодополняющие методы теоретического исследования. В ряде работ применяется основное уравнение [32] и уравнение матрицы плотности в формах Редфилда [33] и Линдблада [34], [35]. В основу используемых методов могут быть положены также численные решения квантовых моделей, в том числе с учетом эффектов многочастичного взаимодействия заряженного носителя со средой. При этом принимаются во внимание молекулярные колебания и, возможно, другие степени свободы окружающего вещества [36]–[38]. Отметим, что механизмы проводимости молекулы ДНК и их детали в нашей статье рассматриваются, в основном, в обзорном плане.

2 Расчет и моделирование

Структуру молекулы ДНК в расплетенном виде визуально можно представить в виде блочной конструкции, у которой в роли каркасных, ведущих элементов выступают азотистые основания, или нуклеотиды, а поперечными соединительными элементами являются водородные связи (рисунок 2.1). Рассмотрим эти азотистые основания и водородные связи как резисторы и конденсаторы с некоторым эффективным сопротивлением и электрической емкостью. В рамках приближенных вычислений предполагается, что все нуклеотиды имеют одинаковый усредненный импеданс, включающий в себя активное и емкостное сопротивление, и все водородные связи – также одинаковый усредненный импеданс. Такой подход является приближенным, поскольку молекула ДНК содержит четыре типа нуклеотидов, каждый из которых может иметь свое активное сопротивление и электроемкость. Аналогично, водородные связи могут иметь различные электрические характеристики, зависящие от типов соединяемых нуклеотидов. Однако молекула ДНК имеет очень большую длину и может содержать десятки тысяч пар азотистых оснований. Для такой длинной электрической цепи главную роль играют именно усредненные значения сопротивлений и емкостей нуклеотидов и водородных связей между ними. Ниже в статье показано, что для фрагментов ДНК, состоящих из ста пятидесяти и более пар нуклеотидов, с учетом ослабления электрического тока вдоль нитей, может быть применена модель очень длинной (в пределе – бесконечной) электрической цепи с повторяющимися звеньями. Такая длинная электрическая цепь может быть охарактеризована усредненными эффективными значениями со-

противлений и емкостей азотистых оснований и водородных связей. Цель статьи – найти значения импедансов, позволяющие в первом приближении получить значения силы тока на различных нуклеотидах и для различных частот переменного тока, измеренные в эксперименте [1].

Эквивалентная электрическая схема молекулы ДНК показана на рисунке 2.1.

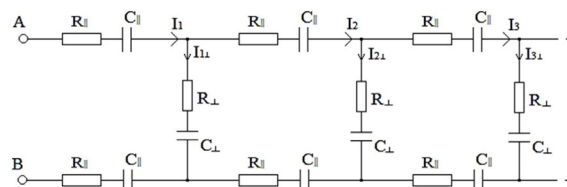


Рисунок 2.1 – ДНК-подобная электрическая цепь

Здесь $R_{||}$ и $C_{||}$ – усредненные эффективные значения активного сопротивления и емкости нуклеотидов, $R_{\perp}$ и $C_{\perp}$ – усредненные эффективные значения активного сопротивления и емкости водородных связей.

Данная цепь может быть представлена в эквивалентном виде с использованием комплексных импедансов нуклеотидов и водородных связей (рисунок 2.2).

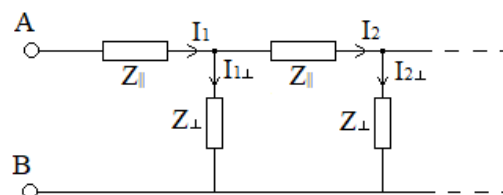


Рисунок 2.2 – Эквивалентный вид ДНК-подобной электрической цепи, характеризуемой комплексными импедансами

Поскольку два резистора $R_{||}$ и две емкости $C_{||}$ соединены последовательно в каждом замкнутом контуре, комплексные импедансы принимают вид

$$Z_{||} = 2 \left(R_{||} - i \frac{1}{\omega C_{||}} \right), \quad Z_{\perp} = R_{\perp} - i \frac{1}{\omega C_{\perp}}, \quad (2.1)$$

где i – мнимая единица.

Используя метод, применяемый в сборнике задач И.Е. Иродова [39] для расчета бесконечных цепей, получаем полный импеданс очень длинной ДНК-подобной цепи

$$Z_{AB} = Z_{\infty} = \frac{Z_{||}}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4Z_{\perp}}{Z_{||}}} \right). \quad (2.2)$$

Эта формула позволяет найти силу тока в первом азотистом основании, ближайшем к источнику тока, который создает напряжение между нитями, равное U_{AB} :

$$I_1 = \frac{U_{AB}}{Z_{AB}}. \quad (2.3)$$

Если выполняется неравенство

$$|Z_{\perp}| \gg |Z_{\parallel}|, \quad (2.4)$$

которое может выполняться для ДНК-подобной цепи, и подтверждается данными, приведенными ниже, то выражение для полного импеданса (2.2) принимает вид

$$Z_{AB} = Z_{\infty} \approx \sqrt{Z_{\parallel} Z_{\perp}}. \quad (2.5)$$

Рассчитывая последовательно токи в каждом следующем звене ДНК-подобной цепи и используя неравенство (2.4), получаем приближенную формулу для силы тока в нуклеотиде с номером k :

$$I_k \approx I_1 \left(1 - (k-1) \sqrt{\frac{Z_{\parallel}}{Z_{\perp}}} \right), \quad (2.6)$$

где $k = 1, 2, 3, \dots$ – номер звена цепи, при этом отсчет ведется от точки приложения напряжения. Сила тока в первом звене I_1 вычисляется по формулам (2.1)–(2.5). Аналогично, при выполнении неравенства (2.4), сила тока в водородной связи звена с номером k равна

$$I_{k\perp} \approx I_1 \sqrt{\frac{Z_{\parallel}}{Z_{\perp}}}. \quad (2.7)$$

В статье [1] в процессе эксперимента измерены значения силы тока в первом $I_1^{(1)}$ и семнадцатом $I_{17}^{(1)}$ нуклеотидах выбранного сегмента молекулы ДНК для одной частоты электрического тока $\nu_1 = 40$ Гц, а также значения силы тока в этих же нуклеотидах $I_1^{(2)}$ и $I_{17}^{(2)}$ того же сегмента ДНК для другой частоты $\nu_2 = 0,05$ Гц. Используя формулы (2.3)–(2.5), получаем следующее выражение

$$\frac{|Z_{\parallel}^{(1)}| \cdot |Z_{\perp}^{(1)}|}{2|I_1^{(1)}|^2} = \frac{|U_1|^2}{2|I_1^{(1)}|^2}, \quad (2.8)$$

где индекс в скобках обозначает первую частоту тока, U_1 – напряжение, создаваемое источником. Такая же формула справедлива для второй частоты. Далее, находя отношение электрических

токов в различных нуклеотидах на двух частотах, получаем выражения для параметров ДНК-подобной электрической цепи

$$C_{\parallel} \approx \frac{\sqrt{\nu_1^2 - \nu_2^2}}{\pi \nu_1 \nu_2} \cdot \frac{1}{\sqrt{|Z_{\parallel}^{(2)}|^2 - |Z_{\parallel}^{(1)}|^2}}, \quad (2.9)$$

$$C_{\perp} \approx \frac{\sqrt{\nu_1^2 - \nu_2^2}}{\pi \nu_1 \nu_2} \cdot \frac{1}{\sqrt{|Z_{\perp}^{(2)}|^2 - |Z_{\perp}^{(1)}|^2}}, \quad (2.10)$$

$$R_{\parallel} \approx \frac{1}{2} \sqrt{|Z_{\parallel}^{(1)}|^2 - \frac{1}{\pi^2 \nu_1^2 C_{\parallel}^2}}, \quad (2.11)$$

$$R_{\perp} \approx \sqrt{|Z_{\perp}^{(1)}|^2 - \frac{1}{4\pi^2 \nu_1^2 C_{\perp}^2}}. \quad (2.12)$$

Здесь $Z_{\parallel}^{(1)}$ и $Z_{\perp}^{(1)}$ – импедансы для первой частоты тока; $Z_{\parallel}^{(2)}$ и $Z_{\perp}^{(2)}$ – импедансы для второй частоты. Значения, полученные из формул (2.9)–(2.12), далее играют роль первого шага в процессе моделирования ДНК-подобной цепи.

Используя экспериментальные данные из статьи (2.1) и аналитические расчеты, проведено численное моделирование и анализ электрической эквивалентной схемы в программе Micro-Cap. В результате получены усредненные значения сопротивлений и емкостей для нуклеотидов и водородных связей: $R_{\parallel} = 6 \cdot 10^3$ Ом, $R_{\perp} = 1,1 \cdot 10^6$ Ом, $C_{\parallel} = 46 \cdot 10^{-6}$ Ф, $C_{\perp} = 3,6 \cdot 10^{-9}$ Ф, при которых значения силы тока в различных звеньях цепи приблизительно соответствуют экспериментальным данным.

На рисунке 2.3 представлены результаты моделирования и анализа бесконечной эквивалентной цепи в программе Micro-Cap для частоты $\nu_1 = 40$ Гц. Значения токов на схеме указаны в микро- (мА) и наноамперах (нА). Как показывают расчеты, модель бесконечной цепи можно использовать, если сегмент ДНК-подобного проводника содержит более ста пятидесяти пар нуклеотидов. Для такой длинной цепи сила тока в ее элементах практически не изменяется при изменении числа звеньев.

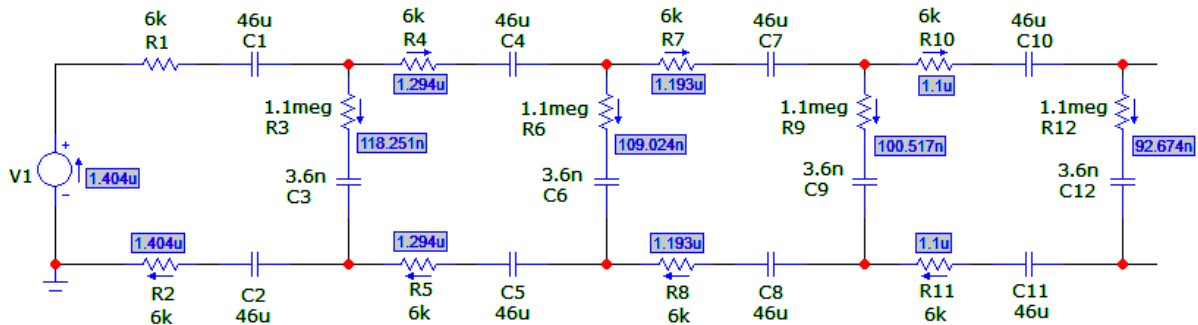


Рисунок 2.3 – Результаты моделирования и анализа электрической схемы для частоты тока $\nu_1 = 40$ Гц

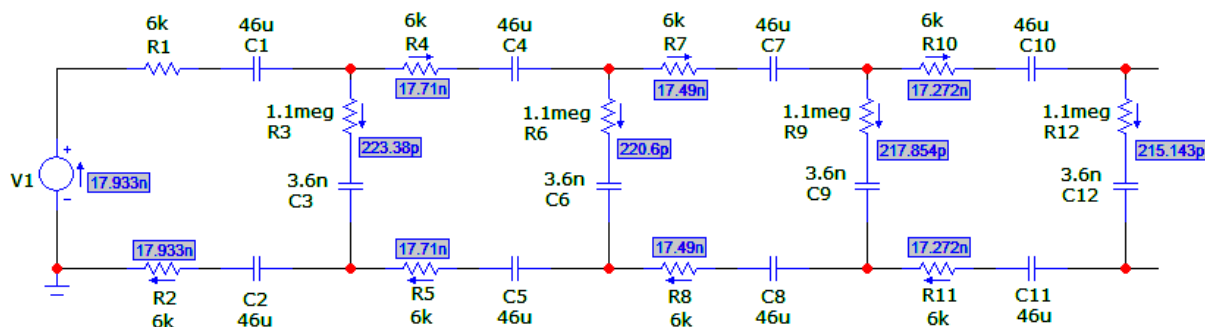


Рисунок 2.4 – Результаты моделирования и анализа электрической схемы для частоты тока $\nu_2 = 0,05$ Гц

Таблица 2.1 – Сравнение экспериментальных и рассчитанных значений силы тока в нуклеотидах для двух частот

Частота	$\nu_1 = 40$ Гц	$\nu_2 = 0,05$ Гц
Сила тока при моделировании	$I_{1(\text{модел})} = 1404$ (нА)	$I_{1(\text{модел})} = 17,9$ (нА)
	$I_{17(\text{модел})} = 382,6$ (нА)	$I_{17(\text{модел})} = 14,7$ (нА)
Сила тока в эксперименте	$I_{1(\text{экспер})} = 1400$ (нА)	$I_{1(\text{экспер})} = 18$ (нА)
	$I_{17(\text{экспер})} = 350$ (нА)	$I_{17(\text{экспер})} = 15$ (нА)

На рисунке 2.4, представлены результаты для аналогичной схемы, но уже для другой частоты $\nu_2 = 0,05$ Гц.

Значения токов, полученные в эксперименте в статье [1] и в результате моделирования, представлены в таблице 2.1 для более наглядного сравнения.

Установлено, что погрешности полученных результатов не превышают 9 процентов для всех значений токов.

Таким образом, значения активного сопротивления и емкостей нуклеотидов, усредненные для четырех типов нуклеотидов, равны $R_{\text{нукл}} = 6 \cdot 10^3$ Ом, $C_{\text{нукл}} = 46 \cdot 10^{-6}$ Ф. Аналогично, усредненные значения активного сопротивления и емкостей водородных связей равны $R_{\text{водор. связь}} = 1,1 \cdot 10^6$ Ом, $C_{\text{водор. связь}} = 3,6 \cdot 10^{-9}$ Ф.

Используя найденные значения активного сопротивления и емкостей нуклеотидов и водородных связей, можно на основе формул (2.1)–(2.5) вычислить импеданс очень длинной молекулы ДНК. Например, для частоты $\nu_1 = 40$ Гц модуль импеданса равен $|Z_{\infty}^{(1)}| \approx 97 \cdot 10^3$ Ом. Аналогично, для частоты $\nu_2 = 0,05$ Гц модуль импеданса очень длинной молекулы ДНК равен $|Z_{\infty}^{(2)}| \approx 7,9 \cdot 10^6$ Ом.

Отметим, что при увеличении длины ДНК-подобной цепи ее импеданс уменьшается. Например, для частоты $\nu_1 = 40$ Гц импеданс бесконечно длинной цепи меньше импеданса ее одного звена приблизительно в 16 раз. Аналогично, для частоты $\nu_2 = 0,05$ Гц импеданс очень длинной молекулы ДНК меньше импеданса одной пары нуклеотидов и их водородной связи приблизительно в 112 раз.

Найденные усредненные значения активных сопротивлений и емкостей нуклеотидов и водородных связей могут быть в дальнейшем использованы при проектировании наноразмерных электрических схем на основе молекулы ДНК.

Заключение

Предложена упрощенная электрическая схема молекулы ДНК как наноразмерного проводника. Введено эффективное комплексное сопротивление, усредненное для всех нуклеотидов, а также эффективное комплексное 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. Вычислены усредненные значения сопротивлений и емкостей нуклеотидов и водородных связей, которые могут быть в дальнейшем использованы при проектировании наноразмерных электрических схем, состоящих из сегментов молекулы ДНК.

ЛИТЕРАТУРА

1. Wohlgamuth, C.H. DNA as a molecular wire: Distance and sequence dependence / C.H. Wohlgamuth, M.A. McWilliams, J.D. Slinker // Analytical chemistry. – 2013. – Т. 85, № 18. – Р. 8634–8640.
2. Dyre, J.C. Universality of ac conduction in disordered solids / J.C. Dyre, T.B. Schröder // Reviews of Modern Physics. – 2000. – Т. 72, № 3. – Р. 873.
3. Dyre, J.C. Hopping models and ac universality / J.C. Dyre, T.B. Schröder // Physica Status Solidi (B). – 2002. – Vol. 230, № 1. – Р. 5–13.

4. Поклонский, Н.А. Флуктуационная модель высокочастотной прыжковой электропроводности умеренно компенсированных полупроводников с водородоподобными примесями / Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, А.Г. Забродский // Физика твердого тела. – 2005. – Т. 47, № 7. – С. 1195–1202.
5. Xu, K. Stepwise oscillatory circuits of a DNA molecule / K. Xu // Journal of biological physics. – 2009. – Vol. 35. – P. 223–230.
6. Eley, D.D. Semiconductivity of organic substances. Part 7. – The polyamides / D.D. Eley, D.I. Spivey // Transactions of the Faraday Society. – 1961. – Vol. 57. – P. 2280–2287.
7. Snart, R.S. The electrical properties and stability of DNA to UV radiation and aromatic hydrocarbons / R.S. Snart // Biopolymers: Original Research on Biomolecules. – 1973. – Vol. 12, № 7. – P. 1493–1503.
8. Tran, P. Charge transport along the λ -DNA double helix / P. Tran, B. Alavi, G. Gruner // Physical Review Letters. – 2000. – Vol. 85, № 7. – P. 1564.
9. Warman, J.M. DNA: a molecular wire? / J.M. Warman, M.P. de Haas, A. Rupprecht // Chemical physics letters. – 1996. – Vol. 249, № 5-6. – P. 319–322.
10. Dewarrat, F. Electric characterization of DNA: diss. / F. Dewarrat. – Basel University: Basel, Switzerland, 2002. – 96 p.
11. Fink, H.W. Electrical conduction through DNA molecules / H.W. Fink, C. Schönenberger // Nature. – 1999. – Vol. 398, № 6726. – P. 407–410.
12. Cai, L. Self-assembled DNA networks and their electrical conductivity / L. Cai, H. Tabata, T. Kawai // Applied Physics Letters. – 2000. – Vol. 77, № 19. – P. 3105–3106.
13. Electrical conduction through poly (dA)-poly (dT) and poly (dG)-poly (dC) DNA molecules / K.H. Yoo [et al.] // Physical review letters. – 2001. – Vol. 87, № 19. – P. 198102.
14. Direct measurement of electrical transport through DNA molecules / D. Porath [et al.] // Nature. – 2000. – Vol. 403, № 6770. – P. 635–638.
15. Proximity-induced superconductivity in DNA / A.Y. Kasumov [et al.] // Science. – 2001. – Vol. 291, № 5502. – P. 280–282.
16. Legrand, O. Single molecule study of DNA conductivity in aqueous environment / O. Legrand, D. Côte, U. Bockelmann // Physical Review E – Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics. – 2006. – Vol. 73, № 3. – P. 031925.
17. Insulating behavior of λ -DNA on the micron scale / Y. Zhang [et al.] // Physical Review Letters. – 2002. – Vol. 89, № 19. – P. 198102.
18. Conductivity of a single DNA duplex bridging a carbon nanotube gap / X. Guo [et al.] // Nature nanotechnology. – 2008. – Vol. 3, № 3. – P. 163–167.
19. Study on the conductivity of DNA molecules under magnetic fields / M. Gao [et al.] // 2021 IEEE International Conference on Manipulation, Manufacturing and Measurement on the Nanoscale (3M-NANO). – IEEE, 2021. – P. 134–137.
20. Electrons on the double helix: optical experiments on native DNA / E. Helgren [et al.] // arXiv preprint cond-mat/0111299. – 2001.
21. Electrical conductivity measurement of λ DNA molecules by conductive atomic force microscopy / Y. Wang [et al.] // Nanotechnology. – 2021. – Vol. 33, № 5. – P. 055301.
22. Mallajosyula, S.S. Toward DNA conductivity: a theoretical perspective / S.S. Mallajosyula, S.K. Pati // The Journal of Physical Chemistry Letters. – 2010. – Vol. 1, № 12. – P. 1881–1894.
23. Additive transport in DNA molecular circuits / T. Sebechlebská [et al.] // Journal of Materials Chemistry C. – 2022. – Vol. 10, № 33. – P. 12022–12031.
24. Wang, J. Electrical conductivity of double stranded DNA measured with ac impedance spectroscopy / J. Wang // Physical Review B – Condensed Matter and Materials Physics. – 2008. – Vol. 78, № 24. – P. 245304.
25. Charra, F. Organic Nanophotonics / F. Charra, V.M. Agranovich, F. Kajzar. – Springer Science & Business Media: Berlin, Germany, 2003. – 502 p.
26. Eley, D.D. Semiconductivity of organic substances. Part 9. Nucleic acid in the dry state / D.D. Eley, D.I. Spivey // Transactions of the Faraday Society. – 1962. – Vol. 58. – P. 411–415.
27. Demple, B. Repair of oxidative damage to DNA: enzymology and biology / B. Demple, L. Harrison // Annual review of biochemistry. – 1994. – Vol. 63, № 1. – P. 915–948.
28. Hall, D.B. Oxidative DNA damage through long-range electron transfer / D.B. Hall, R.E. Holmlin, J.K. Barton // Nature. – 1996. – Vol. 382, № 6593. – P. 731–735.
29. Petty, M.C. An Introduction to Molecular Electronics / M.C. Petty, M.R. Bryce, D. Bloor. – L.: Oxford University Press, 1995. – 387 p.
30. Baker, R.J. CMOS: Circuit Design, Layout, and Simulation / R.J. Baker. – New York: Wiley, 2008. – 1208 p.
31. Лахно, В.Д. Молекулярные устройства на основе ДНК. Нанобиоэлектроника / В.Д. Лахно, А.В. Винников // Препринты Института прикладной математики им. МВ Келдыша РАН. – 2018, № 137. – С. 26.
32. Petrov, E.G. Bridge mediated electron transfer: a unified description of the thermally activated and superexchange mechanisms / E.G. Petrov, Y.R. Zelinsky, V. May // The Journal of Physical Chemistry B. – 2002. – Vol. 106, № 12. – P. 3092–3102.
33. Electron transfer rates in bridged molecular systems 2. A steady-state analysis of coherent tunneling and thermal transitions / D. Segal [et al.] //

The Journal of Physical Chemistry B. – 2000. – Vol. 104, № 16. – P. 3817–3829.

34. *Alicki, R.* Quantum Dynamical Semigroups and Applications / R. Alicki, K. Lendi // Lect. Notes Phys. – 2007. – Vol. 717. – 129 p.

35. *Charge transport in molecular systems: A theoretical approach* / E.A. Weiss [et al.] // J. Chem. Phys. – 2006. – Vol. 124. – P. 074501.

36. *Lakhno, V.D.* Sequence dependent hole evolution in DNA / V.D. Lakhno // Journal of Biological Physics. – 2004. – Vol. 30. – P. 123–138.

37. *Фиалко, Н.С.* Перенос заряда в 1D-цепочке «донор-мостик-акцептор» при $T = 300$ К / Н.С. Фиалко, В.Д. Лахно // Препринты Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН. – 2018. – № 77. – 17 с.

38. *Сюракшин, А.В.* Перенос заряда в молекуле ДНК в рамках простой модели открытой квантовой системы / А.В. Сюракшин, В.Д. Лахно, В.Ю. Юшанхай // Препринты Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН. – 2021. – № 23. – 26 с.

39. *Иродов, И.Е.* Задачи по общей физике / И.Е. Иродов. – Москва: Наука, 1988. – 416 с.

Работа выполнена в рамках ГПНИ КОН-ВЕРГЕНЦИЯ-2025, подпрограмма «Междисциплинарные исследования и новые зарождающиеся технологии».

Поступила в редакцию 14.01.2025.

Информация об авторах

Семченко Игорь Валентинович – д.ф.-м.н., профессор, чл.-корр. НАН Беларуси

Пискунова Екатерина Дмитриевна – магистрантка

Самофалов Андрей Леонидович – к.ф.-м.н., доцент

Сомов Павел Владиславович – ассистент