

УДК 519.6

Адиабатическое приближение при расчетах подвижности заряда в холстейновской модели ДНК

Тихонов Д.А.* , Соколов Е.В., Лахно В.Д., Фиалко Н.С.†

*Институт математических проблем биологии, Российская академия наук, Пущино,
Московская область, 142290, Россия*

Аннотация. В холстейновской модели распространение заряда (квантовой частицы) вдоль цепочки сайтов и движения классических сайтов цепочки описывается самосогласованной системой ОДУ (поляронная модель). Для расчета подвижности заряда при заданной температуре окружающей среды рассмотрено линейное адиабатическое приближение, при котором движение заряда не влияет на смещения сайтов. В этом приближении расчет значительно ускоряется. Проведенное сравнение результатов расчета поляронной и рассматриваемой адиабатической моделей дает совпадающие величины коэффициента диффузии с точностью до стандартной ошибки среднего.

Ключевые слова: модель Холстейна, уравнение Ланжевена, подвижность, ДНК, адиабатическое приближение, метод Магнуса, аппроксимация матричной экспоненты

ВВЕДЕНИЕ

В связи с развитием нанобиоэлектроники, новой ветви науки, объединяющей молекулярную биологию и наноэлектронику [1, 2], представляет интерес исследование проводящих свойств молекул ДНК.

Ранее авторами [3] был предложен следующий способ оценки подвижности заряда в дискретной модели ДНК с использованием формул Кубо. На основе гамильтониана Холстейна была разработана модель переноса заряда в ДНК [3, 4]. В цепочку сайтов (в ДНК сайту соответствует комплементарная пара оснований) привносится избыточный заряд (электрон или дырка). Распространение заряда влияет на движения сайтов, и наоборот, смещение сайта изменяет вероятность нахождения заряда на нем. Движения этой системы описываются системой связанных дифференциальных уравнений. Для моделирования температуры термостата в классические уравнения движения сайтов добавляется случайная сила со специальными статистическими свойствами (уравнения Ланжевена). Для оценки величины подвижности дырки в цепочке надо рассчитать множество реализаций (траекторий системы) при заданной температуре термостата и найти зависимость среднеквадратичного смещения дырки от времени.

В данной работе приводится описание и результаты адиабатического приближения этой модели при расчете подвижности заряда.

Мы понимаем термин «адиабатическое приближение» в широком смысле. Идея приближения основана на том, что характерные для модели ДНК значения параметров

* dmitry.tikhonov@gmail.com

† fialka@impb.psn.ru

квантовой и классической подсистем существенно различаются (частоты колебаний классических переменных на 2 порядка меньше). Поэтому для расчета подвижности было предложено следующее: при моделировании распространения заряда в бесконечной цепочке заряд не успевает повлиять на поведение классических сайтов, т.е. не учитывается влияние быстрой квантовой подсистемы на медленную классическую. Движение сайтов происходит только под влиянием температурных флуктуаций окружающей среды, средние смещения сайтов нулевые. Т.е. распространение заряда описывается линейным уравнением Шредингера с зависящими от времени коэффициентами, которые специальным образом учитывают температурные флуктуации.

Результаты расчетов подвижности оказались очень близки для поляронной и приближенной моделей. Однако во втором случае адиабатическое приближение позволяет значительно ускорить расчеты отдельной реализации (примерно в 850 раз), и соответственно, за то же машинное время получить более точные значения средних величин.

УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ

Модель базируется на гамильтониане Холстейна для дискретной цепочки сайтов [5]. В случае ДНК сайтом считаем комплементарную нуклеотидную пару. Выбирая волновую функцию Ψ в виде $\Psi = \sum_{n=1}^N b_n |n\rangle$, где b_n – амплитуда вероятности нахождения заряда на n -ом сайте ($n = 1, \dots, N$, N – длина цепочки), получим осредненный гамильтониан:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_{m,n} v_{mn} b_m b_n^* + \sum_i \frac{M \dot{\tilde{u}}_i^2}{2} + \sum_i \frac{K \tilde{u}_i^2}{2} + \sum_i \frac{K_s (\tilde{u}_i - \tilde{u}_{i-1})^2}{2} + \sum_n \tilde{\chi} \tilde{u}_n b_n b_n^*. \quad (1)$$

Здесь v_{mn} ($m \neq n$) – матричные элементы перехода электрона между m -м и n -м сайтами, v_{nn} – энергия заряда на n -ом сайте, $\tilde{\chi}$ – константа связи электрона со смещениями \tilde{u}_n n -го сайта из равновесного положения, M – эффективная масса сайта, K – упругая постоянная, K_s – константа, определяющая вклад дисперсии в энергию цепочки. Мы используем приближение ближайших соседей, т.е. $v_{mn} = 0$, если $m \neq n \pm 1$.

Уравнения движения, полученные из гамильтониана (1), после обезразмеривания имеют вид:

$$i\dot{b}_n = \eta_{n,n-1} b_{n-1} + \eta_{n,n} b_n + \eta_{n,n+1} b_{n+1} + \chi u_n b_n, \quad (2)$$

$$\ddot{u}_n = -(\omega^2 + 2\xi) u_n + \xi(u_{n+1} + u_{n-1}) - \chi |b_n|^2 - \gamma \dot{u}_n + Z_n(t). \quad (3)$$

Здесь $b_n(t)$ – амплитуда вероятности нахождения заряда на n -ом сайте, $u_n(t)$ – смещение n -го сайта из равновесного положения. Связь размерных параметров с безразмерными следующая. Характерное время τ , $\tilde{t} = \tau t$, характерный масштаб колебаний U^* , $\tilde{u}_n = U^* u_n$. Матричные элементы $\eta_{mn} = v_{mn} \tau / \hbar$, частоты колебаний сайтов $\omega = \sqrt{\tau^2 K / M} = \tau \tilde{\omega}$, коэффициент дисперсии (в случае ДНК определяемый стэкинговым взаимодействием [6]) $\xi = \sqrt{\tau^2 K_s / M}$. Константа связи квантовой и классической частей системы $\chi = \tilde{\chi} \sqrt{\tau^3 / \hbar M}$, $U^* = \sqrt{\tau \hbar / M}$. Для моделирования тепловых толчков термостата в подсистему (3) добавлены (уравнение Ланжевена) член с трением $\gamma = \tilde{\gamma} \tau / M$ ($\tilde{\gamma}$ – коэффициент трения) и случайная сила $Z_n(t)$ со свойствами

$$\langle Z_n(t) \rangle = 0,$$

$$\langle Z_n(t) Z_k(t') \rangle = 2k_B T \left(\frac{\tilde{\gamma} \tau^3}{M^2 U^{*2}} \right) \delta_{kn} \delta(\tilde{t} - \tilde{t}') = \left(2k_B T^* \frac{\tau}{\hbar} \right) \left[\frac{T}{T^*} \right] \gamma \delta_{kn} \delta(t - t'),$$

T^* – характерная температура ($T^* = 100\text{K}$). Подробнее о модели и обезразмеривании см., например, [7].

Параметры модели, соответствующие фрагменту ДНК: $\tau = 10^{-14}$ с., $M = 10^{-21}$ г. Безразмерные частоты классических сайтов $\omega = 0.01$ (пикосекундная частота колебаний сайтов $\tilde{\omega} = 10^{12}$ с $^{-1}$ соответствует жесткости $K \sim 0.062$ эВ/Å 2 водородных связей между комплементарными основаниями), $\xi = 6.4 \cdot 10^{-5}$ ($K_S = 0.04$ эВ/Å 2 [6]), $\chi = 0.02$ ($\tilde{\chi} = 0.13$ эВ/Å), $\gamma = 0.006$ ($\tilde{\gamma} = 6 \cdot 10^{11}$ с $^{-1}$) [4, 8–11]. Безразмерные значения матричных элементов η_{mn} и $\eta_{m\pm 1}$ для рассмотренных в статье полинуклеотидов приведены в таблицах 1 и 2.

Таблица 1. Матричные элементы перехода между сайтами $\eta_{n,n+1} = \eta_{n+1,n}$, направление 5'–3' [8, 9]

	GG	AA	CC	TT	GT	TG	GC	CG	AT	TA
$\eta_{n,n+1}$	1.276	0.456	0.623	2.4	2.081	1.291	1.671	0.638	1.595	1.307

Таблица 2. Диагональные матричные элементы $\eta_{n,n}$ [10]

	G	C	A	T
$\eta_{n,n}$	0.0	10.0	6.84	10.0

Для оценки величины подвижности дырки в цепочке используется метод, описанный в [3], т.е. рассчитывается множество реализаций при заданной температуре T окружающей среды. Численно интегрируя систему (2), (3) из заданных начальных условий 2o2s1g-методом [12], мы находим динамику заряда $b_n(t)$ и траектории сайтов при заданной температуре в отдельной реализации.

При расчетах подвижности заряда начальные данные для классических сайтов задаются соответствующими равновесному распределению при заданной температуре. Заряд в начальный момент локализован в центре цепочки на сайте с номером 0, $b_0(t=0) = 1$.

По осредненному среднеквадратичному смещению

$$\langle X^2(t) \rangle = \left\langle \sum_{n=-[N/2]}^{[N/2]} |b_n(t)|^2 n^2 \right\rangle = \left\langle \sum_{n=-[N/2]}^{[N/2]} P_n(t) n^2 \right\rangle \quad (4)$$

($P_n = |b_n(t)|^2$ – вероятность нахождения заряда на n -ом сайте в момент t) ищется коэффициент диффузии D , $\langle X^2(t) \rangle = 2Dt$, и из него оценивается подвижность заряда $\mu = eD/k_B T$ (e – заряд электрона).

Типичный график $\langle X^2(t) \rangle$ при расчетах в конечной цепочке выглядит так: сначала парабола [3], потом прямолинейный участок $\sim k t = 2Dt$, и плавный загиб, когда $b_n(t)$ становится существенной на краях цепочки (с последующим выходом на константу). Нас интересует прямолинейный участок. Подвижность можно найти по углу наклона «прямолинейного» участка $\langle X^2(t) \rangle$. Можно по другому – если с какого-то момента $\langle X^2(t) \rangle \sim k t + c$, то $d\langle X^2(t) \rangle/dt \sim k$ и $d^2\langle X^2(t) \rangle/dt^2 = 0$. Т.е. можно считать начальный участок, от $t = 0$ до момента, когда первая производная $d\langle X^2(t) \rangle/dt$ выходит на прямую параллельно оси t . В этом случае получается выигрыш по времени – нужно считать на коротком интервале, однако производная получается более «зашумленной», поэтому надо усреднять большее число реализаций.

АДИАБАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Параметры для квантовой и классической подсистем ДНК сильно различны – на 2 порядка. Было сделано предположение, что при этих условиях можно использовать адиабатическое приближение – не учитывать влияние «быстрой квантовой» подсистемы на «медленную» классическую (сайты не успевают почувствовать воздействие частицы). Это предположение оказалось верным. При этом система (2), (3) расцепляется. Уравнения (3) переходят в независимую от b_n систему уравнений Ланжевена

$$\ddot{u}_n = -(\omega^2 + 2\xi)u_n + \xi(u_{n+1} + u_{n-1}) - \gamma\dot{u}_n + Z_n(t), \quad (5)$$

которая интегрируется отдельно с большим шагом; для расчетов (5) мы использовали численный метод [12]. Подсистема (2) при этом становится линейной системой ОДУ, в которой в член $\chi u_n b_n$ подставляются «внешние» значения u_n . В матричной записи, решается система

$$i \frac{d\mathbf{b}}{dt} = \mathbf{A}(t)\mathbf{b}, \quad (6)$$

где $\mathbf{b} = (b_1, \dots, b_n)$ – вектор переменных, и матрица \mathbf{A} трехдиагональная:

$$\mathbf{A} = [\eta] + \text{diag}(\chi u_n(t)), [\eta] = \begin{pmatrix} \eta_{11} & \eta_{12} & 0 & 0 & \cdot & 0 \\ \eta_{21} & \eta_{22} & \eta_{23} & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & \eta_{32} & \eta_{33} & \eta_{34} & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & \eta_{43} & \eta_{44} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \eta_{mm} \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Интегрировать систему (6) можно методом разложения в ряд Магнуса [13]. Мы использовали конечно-разностную реализацию метода Магнуса второго порядка точности, которая приведена в обзоре [14]. Решение (6) на n -ом шаге интегрирования h сводится к системе уравнений

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{A}\left(t_n + \frac{h}{2}\right), \quad \mathbf{b}(t_n + 1) = e^{-h\mathbf{A}_1}\mathbf{b}(t_n). \quad (8)$$

Наиболее трудоемкой задачей при решении (8) является вычисление матричной экспоненты. Для ее расчета мы воспользовались способом, примененным в работах [15, 16]. В этих работах экспоненту симметричной трехдиагональной матрицы предлагается вычислять путем рациональной аппроксимации.

Экспоненту можно аппроксимировать рациональной функцией $R_m(z)$, которую представим в виде суммы простейших дробей:

$$e^{-z} \approx R_m(z) \equiv \frac{p_m(z)}{q_m(z)} = a_0 + \sum_{j=1}^m \frac{a_j}{z - \theta_j}. \quad (9)$$

Для случая рациональной аппроксимации Чебышева, которая минимизирует максимальную ошибку аппроксимации экспоненты на интервале $[0; \infty)$, коэффициенты a_j и полюса θ_j приведены в работе [15] для $m = 10$ и $m = 14$.

Тогда для симметричной трехдиагональной положительно полуопределенной

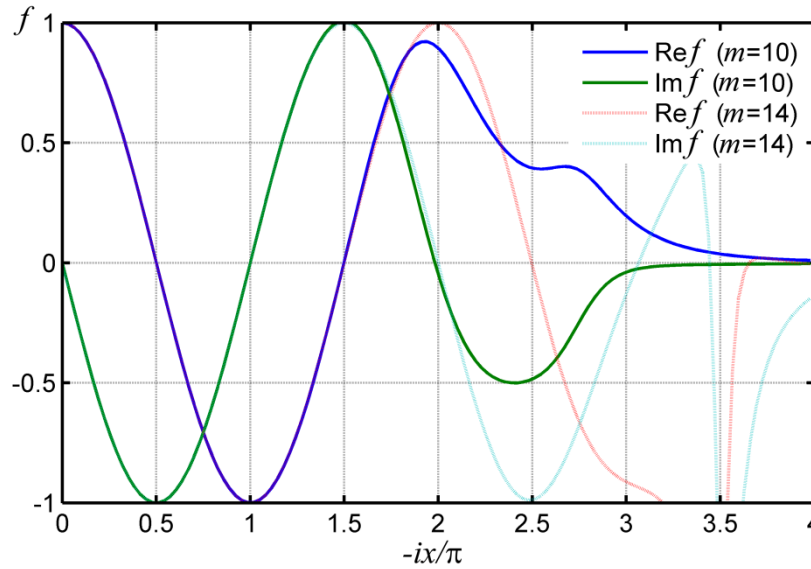


Рис. 1. Рациональная аппроксимация Чебышева функции $f(x) = e^{-ix}$ ($x \in \mathbb{R}$) для $m = 10$ и $m = 14$.

матрицы T и произвольного вектора x

$$e^{-T} x \approx a_0 x + \sum_{j=1}^m a_j y_j, \tag{10}$$

где векторы y_j являются решениями систем линейных уравнений

$$(T - \theta_j I) y_j = x, j = 1, \dots, m. \tag{11}$$

Поскольку T является трехдиагональной матрицей, то для решения (11) относительно y_j мы использовали метод прогонки.

Чтобы гарантировать, что T является положительно полуопределенной матрицей, следуя работе [16], мы находили минимальное собственное значение λ_1 матрицы A_1 и произведение экспоненты матрицы на вектор (10) считали для матрицы $T = hi(A_1 - \lambda_1 I)$ и вектора $x = b(t_n)$:

$$e^{-hiA_1} b(t_n) = e^{-hi\lambda_1} e^{-hi(A_1 - \lambda_1 I)} b(t_n) = e^{-hi\lambda_1} e^{-T} x.$$

Для действительных $z \geq 0$ при $m = 14$ на всей положительной полуоси ошибка рациональной аппроксимации Чебышева (9) не превышает $2 \cdot 10^{-14}$, однако, для мнимых z это не так. На рис. 1 приведены результаты аппроксимации для чисто мнимых значений. Видно, что (9) справедливо только в ограниченной области z . Матрицы в экспонентах уравнений (8) являются мнимыми, поэтому нам следует выбирать шаг h в схеме (8) так, чтобы норма матрицы оставалась в допустимом диапазоне. Это легко осуществить, если оценивать максимальные собственные λ_n значения матрицы A_1 и корректировать шаг адаптивно.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Для поляронной и адиабатической моделей были проведены расчеты коэффициента диффузии дырки в однородных цепочках при различной температуре термостата, а также в регулярных фрагментах вида $(GC)_n$, $(AT)_n$ и $(GTTT)_n$ при $T = 300K$.

Рассчитанные значения оказались одинаковыми с точностью до стандартной ошибки среднего.

Графики зависимости коэффициентов диффузии от температуры для однородных полинуклеотидов приведены на рис. 2.

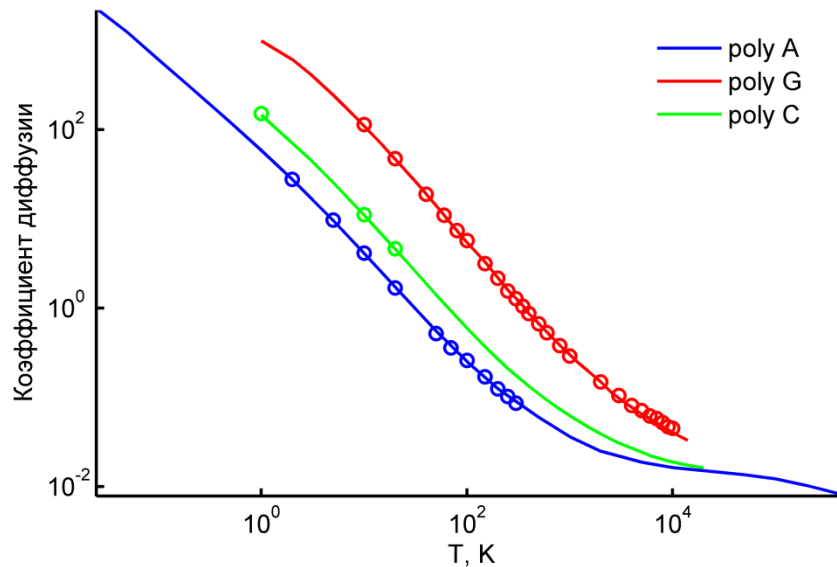


Рис. 2. Непрерывные линии – рассчитанные в адиабатическом приближении значения коэффициентов диффузии, кружочки – величины, рассчитанные для поляронной модели. Оси в логарифмическом масштабе.

Рассчитанные значения коэффициента диффузии при $T = 300\text{K}$ для регулярных фрагментов приведены в таблице 3. Там же указаны значения для однородной polyG цепочки с учетом дисперсии ξ классических сайтов (см. (3) и (5)) и без нее, а также с другим коэффициентом трения.

Точные уравнения считались с гораздо меньшей статистикой (100–500 реализаций), чем адиабатические (порядка 10^4 – 10^5 реализаций). При расчете D в поляронной модели мы оценивали $\langle X^2(t) \rangle$ линейной регрессией, и погрешность не оценивалась. В адиабатической модели значение D оценивалось по производной $d\langle X^2(t) \rangle/dt$, и для них в таблице 3 приведены средние и погрешности (среднеквадратичное отклонение).

Отметим, что в [17] приведены неправильные значения подвижности μ для $(\text{GTT})_n$ и $(\text{GTTT})_n$ (коэффициенты диффузии $D \sim 2.4$ и 2.9 , соответственно, были посчитаны с неверными диагональными элементами η). Ошибка обнаружилась при сравнении этих двух моделей.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Результаты расчетов подвижности с помощью двух разных моделей оказались одинаковы. Наличие дисперсионного члена $\xi \neq 0$ не нарушает сходства результатов поляронной и адиабатической модели, так же как и изменение коэффициента трения γ .

Сравнение динамики средних вероятностей нахождения заряда на сайтах в этих

Таблица 3. Сравнение коэффициентов диффузии D , рассчитанных в поляронной модели и адиабатическом приближении, для различных цепочек при $T = 300\text{K}$

Фрагмент	D (поляронная модель)	D (адиабатическая модель)
$(\text{GC})_n$ ($\xi=0$.)	0.051	0.0520 ± 0.0016
$(\text{GTTT})_n$ ($\xi=0$.)	0.2	0.1997 ± 0.0774
$(\text{GTT})_n$ ($\xi=0$.)	0.17	0.1641 ± 0.0783
$(\text{AT})_n$ ($\xi=0$.)	0.4	0.4039 ± 0.0151
$(\text{AT})_n$ ($\xi = 0.000064$)	0.88	0.8728 ± 0.0412
GGG ($\xi=0$.)	1.28	1.280 ± 0.034
GGG ($\xi = 0.000064$)	5.6	5.577 ± 0.22
GG ($\xi=0$., $\gamma = 0.03$)	1.1	1.052 ± 0.043

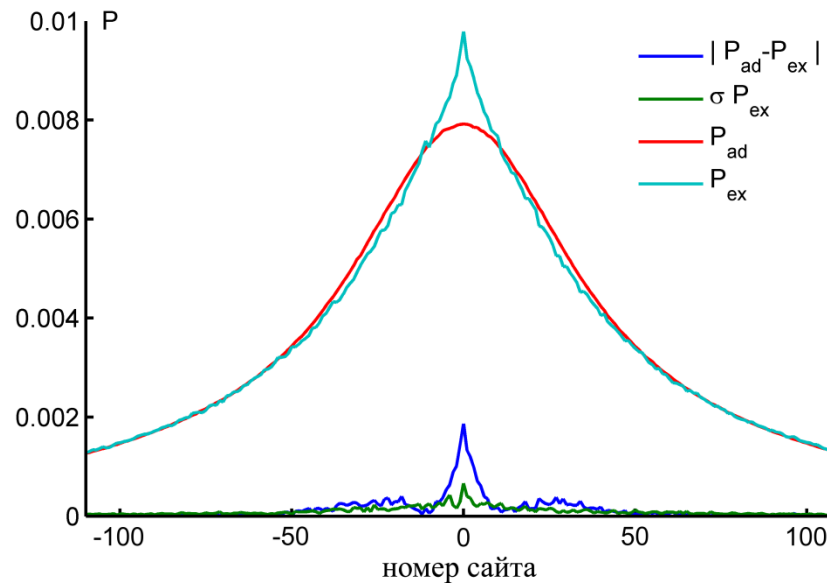


Рис. 3. Распределение вероятностей для поляронной и адиабатической моделей в расчетный момент $t = 1500$, polyC-фрагмент, длина цепочки 1499 сайтов, $T = 20\text{K}$, нумерация сайтов от середины (сайта, на котором при $t = 0$ локализован заряд).

моделях показало, что на начальном этапе расчетов, при временах $0 < t < t_R$, существенная разница появляется в середине цепочки (на нескольких сайтах вокруг центра, где в момент $t = 0$ «возникает» заряд), а ближе к краям вероятности почти одинаковы все время счета. На рис. 3 приведены графики распределения вероятностей по сайтам $P_n = |b_n(t)|^2$ в момент $t = 1500$ в середине цепочки polyC длиной 1500 сайтов при $T = 20\text{K}$, P_{ex} – вероятности, рассчитанные по поляронной модели (2), (3), среднее по 10000 реализаций; P_{ad} – вероятности, рассчитанные по адиабатической модели (6) с матричными коэффициентами (7), среднее по 300000 реализаций. Зеленая линия внизу – среднеквадратичное отклонение σP_{ex} (σP_{ad} практически ноль – очень большое число реализаций), и синяя – разность решений двух моделей $|P_{ad} - P_{ex}|$. Видно, что в середине цепочки эта разность значительно больше, чем σP_{ex} , а ближе к краям она находится в пределах статистической погрешности. Отметим, что на этом времени заряд уже находится в делокализованном состоянии – вероятность нахождения заряда на среднем сайте < 0.01 .

В поляронной модели (2), (3) из-за возникновения заряда в момент $t = 0$ на этом сайте возникает смещение, которое со временем из-за перераспределения заряда и воздействия случайной силы исчезает. Время «забывания начальных данных» t_R (по истечении которого смещения и скорости всех сайтов соответствуют равновесному распределению при заданной температуре) в однородных цепочках имеет порядок нескольких периодов колебаний классических сайтов.

Величина $\langle X^2(t) \rangle$ (см. формулу (4)), и, соответственно, коэффициент диффузии и подвижности, зависит от значений $P_n(t)$ и от номеров сайтов n . Хотя в центре цепочки (около сайта с номером $n = 0$) вероятности в поляронной и адиабатической моделях различаются, дальше по цепочке и номера сайтов n больше, и $P_n(t)$ одинаковы, поэтому значения коэффициента диффузии в обеих моделях очень близки.

По результатам моделирования можно предположить, что в данной задаче скорость расплывания вероятностей с центрального сайта по цепочке зависит главным образом от температуры, а влияние связи квантовой подсистемы с классической на эту скорость пренебрежимо мало.

Это утверждение верно не только при больших температурах $T > 100\text{K}$, но и при низких температурах, что совсем не очевидно. Например, для цепочки polyC при $T = 1\text{K}$ коэффициент подвижности D для поляронной модели 151.665 ± 0.136 (здесь

был проведен расчет 10000 реализаций, и сделана оценка среднего и погрешности по производной $d\langle X^2(t) \rangle / dt$, и для адиабатической $D = 151.247 \pm 0.112$.

Вопрос о границах применимости адиабатического приближения – тема дальнейших исследований.

По результатам работы можно сделать выводы:

- для расчета подвижности при рассмотренных условиях в однородных и регулярных полинуклеотидных фрагментах можно применять адиабатическую модель;
- для адиабатической модели предложенные методы интегрирования позволяют ускорить расчет реализаций на три порядка.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Вид рассчитанной температурной зависимости коэффициента диффузии в области низких температур отличается от температурной зависимости, полученной Холстейном [5]. На наш взгляд, получаемый при моделировании прямолинейный участок в зависимости $\langle X^2(t) \rangle$, свидетельствует о том, что при высоких температурах устанавливается равновесное состояние; а при низких температурах прямолинейный участок соответствует квазиравновесному состоянию в цепочке, когда заряд не перешел в поляронное состояние (квазиравновесные состояния в гетерогенных цепочках ДНК рассматривались в [18]). Мы полагаем, что при низких температурах помимо найденного решения, существуют и другие решения, которые не могут быть получены в линейном адиабатическом приближении. Что касается поляронной модели, из физических представлений можно предположить, что по истечении достаточно большого времени при достаточно низкой температуре заряд перейдет в энергетически выигрышное поляронное состояние, что придаст температурной зависимости холстейновский вид [1].

Полученные в работе результаты представляют важность при моделировании проводящих свойств ДНК-проводов в нанобиоэлектронике, когда характерные времена работы электронных элементов составляют пикосекунды, и равновесные состояния не успевают образовываться. В этом случае в соответствующих формулах Кубо для кинетических коэффициентов можно использовать квазиравновесные адиабатические состояния, рассмотренные в работе.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, гранты № 10-07-00112, 11-07-00635, 11-07-12054-офи-м-2011. Авторы благодарны сотрудникам НИВЦ МГУ «Ломоносов» за любезно предоставленную возможность проведения расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lakhno V.D. DNA nanobioelectronics. *International Journal of Quantum Chemistry*. 2008. V. 108. P. 1970–1981.
2. *Nanobioelectronics – for Electronics, Biology, and Medicine*. Eds. Offenhäuser A., Rinaldi R. New York: Springer, 2009. 337 p.
3. Лахно В.Д., Фиалко Н.С. Подвижность дырок в однородной нуклеотидной цепочке. *Письма в ЖЭТФ*. 2003. Т. 78. С. 786–788.
4. Fialko N.S., Lakhno V.D. Nonlinear dynamics of excitations in DNA. *Physics Letters A*. 2000. V. 278. P. 108–111.
5. Holstein T. Studies of polaron motion: Part I. The molecular-crystal model. *Annals of Physics*. 1959. V. 8. P. 325–342.
6. Komineas S., Kalosakas G., Bishop A.R. Effects of intrinsic base-pair fluctuations on charge transport in DNA. *Physical Review E*. 2002. V. 65. P. 061905.

7. Лахно В.Д., Фиалко Н.С. В: *Динамические модели процессов в клетках и субклеточных структурах*. Под ред. Ризниченко Г.Ю., Рубина А.Б., М.–Ижевск: НИЦ Регулярная и хаотическая динамика, 2010. С. 11–67.
8. Voityuk A.A., Rösch N., Bixon M., Jortner J. Electronic Coupling for Charge Transfer and Transport in DNA. *The Journal of Physical Chemistry B*. 2000. V. 104. P. 9740–9745.
9. Jortner J., Bixon M., Voityuk A.A., Rösch N. Superexchange Mediated Charge Hopping in DNA. *The Journal of Physical Chemistry A*. 2002. V. 106. P. 7599–7606.
10. Lewis F.D., Wu Y. Dynamics of superexchange photoinduced electron transfer in duplex DNA. *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews*. 2001. V. 2. P. 1–16.
11. Lakhno V.D. Davydov's solitons in homogeneous nucleotide chain. *International Journal of Quantum Chemistry*. 2010. V. 110. P. 127–137.
12. Greenside H.S., Helfand E. Numerical integration of stochastic differential equations II. *Bell System Technical Journal*. 1981. V. 60. P. 1927–1940.
13. Magnus W. On the exponential solution of differential equations for a linear operator. *Communications on Pure and Applied Mathematics*. 1954. V. 7. P. 649–673.
14. Del Buono N, Lopez L. A survey on methods for computing matrix exponentials in numerical schemes for ODEs. In: *Computational Science — ICCS 2003*. Eds. Sloot P., Abramson D., Bogdanov A., Gorbachev Y., Dongarra J., Zomaya A. Berlin/Heidelberg: Springer, 2003. P. 111–120.
15. Gallopoulos G., Saad Y., Efficient solution of parabolic equations by Krylov approximation methods. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*. 1992, V. 13. P. 1236–1264.
16. Lu Y.Y. Exponentials of Symmetric Matrices through Tridiagonal Reductions. URL: <http://math.cityu.edu.hk/~mayyulu/papers/matexp.pdf> (дата обращения: 15.11.2011).
17. Фиалко Н.В. Перенос заряда в ДНК. *Численное моделирование процессов переноса заряда в дискретных молекулярных цепочках*. Saarbrücken, Germany: Lambert Academic Publishing, 2010. 93 с. ISBN 978-3-8433-0054-4.
18. Лахно В.Д., Султанов В.Б. О возможности сверхбыстрого переноса заряда в ДНК. *Математическая биология и биоинформатика*. 2009. Т. 4. С. 46–51. URL: [http://www.matbio.org/downloads/Lakhno2009\(4_46\).pdf](http://www.matbio.org/downloads/Lakhno2009(4_46).pdf) (дата обращения: 15.11.2011).

Материал поступил в редакцию 24.11.2011, опубликован 28.11.2011.