

## **ХРАНИЛИЩЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ПЕРЕНОСУ ЗАРЯДА В КВАЗИ-ОДНОМЕРНЫХ МАКРОМОЛЕКУЛАХ**

**Фиалко Н.С., Парамонова Е.В., Зайцев А.Ю., Авакян Л.А.<sup>1</sup>**

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

<sup>1</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования Южный Федеральный Университет, физический факультет, Россия, 344090, г.Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5

В настоящее время внимание исследователей привлекает возможность применения биологических макромолекул, в первую очередь ДНК, в нанобиоэлектронике, например, при разработке электронных биочипов и использовании ДНК в качестве молекулярных проволок. Поэтому большой интерес представляет изучение проводящих свойств молекулярных цепочек.

В ИМПБ РАН в течение ряда лет ведутся работы по моделированию переноса заряда в квазиодномерных макромолекулах. Изучаются различные варианты взаимодействий сайтов классической цепочки. Моделирование миграции заряда вдоль цепочки (например, фрагмента ДНК с известной последовательностью) при заданной температуре термостата – процесс, требующий значительных вычислительных мощностей и большого дискового пространства. Необходим удобный инструмент для дальнейшей работы с накопленными данными. По этой причине разработан прототип системы классификации и визуализации результатов моделирования. Серверная часть системы состоит из хранилища файлов и базы данных (MySQL). В БД внесены ключевые параметры (коэффициенты, для которых проводился вычислительный эксперимент, рассчитанная подвижность заряда, полная энергия системы, характеристика механизма распространения (полярон или делокализованное состояние) и т.д.). По совокупности параметров можно выбрать соответствующую группу расчетов, отсортировать по другим признакам и т.п. Клиентская часть представляет собой web-интерфейс к базе, который позволяет, используя любой современный браузер, выполнять сортировку, выбор и визуализацию результатов моделирования.

Созданная база данных может использоваться для поиска параметров 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, грант 14-07-00894.