

ВЛИЯНИЕ БИСТАБИЛЬНОСТИ НА ДИНАМИКУ МОЛЕКУЛЫ ДНК В РАЗЛИЧНЫХ ПРОЦЕССАХ.

И.П. Кикоть, Н.А. Ковалева, Е.А. Зубова

ИХФ РАН, Россия, 119991, Москва, ул. Косыгина, 4, тел.(495)939-71-39

e-mail: irakikotx@gmail.com

Одной из главных молекул в живой природе является молекула ДНК, и именно исследование данной молекулы привлекает все больше внимания ученых из разных областей - физики, химии, биологии. Однако экспериментальные исследования данной молекулы имеют ряд ограничений. Многие структуры, существенные для понимания механизма таких важных явлений, как А-В переход, плавление, упаковка двойной спирали, оказываются короткоживущими. Также экспериментально трудно получить информацию об энергетических вкладах различных областей молекулы и взаимодействиях между ее частями при важных физических процессах без существенного возмущения системы. В связи с этим возникли компьютерные методы и модели. Наиболее наглядным методом является полноатомная молекулярная динамика, однако при моделировании сложных систем возникают существенные ограничения. При исследовании больших отрезков ДНК приходится ограничиваться небольшими отрезками времени наблюдения, а длительное наблюдение динамики возможно только для сравнительно небольших молекул.

Ранее нами была предложена крупно-зернистая модель [1,2], которая значительно эффективнее полноатомного представления в компьютерном счете, однако практически полностью описывает структуру двойной спирали ДНК, воспроизводит спиральные параметры, скорость продольного и крутильного звука, качественные особенности поведения при растяжении. Однако существенным ограничением нашей модели было то, что она описывала только незначительные отклонения от основного состояния – В-формы ДНК, тогда как даже при молекулярно-динамических расчетах молекулы ДНК в В-форме наблюдаются заметные отклонения в сторону А-конформации.

В данной работе, проанализировав полноатомную динамику, мы провели модернизацию нашей модели и учли возможность конформационного перехода от А-ДНК к В-ДНК. Для этого был введен двухъямный потенциал, позволяющий учесть две конформации рибозного кольца. Наличие такой подвижности в нашей модели позволяет значительно более точно моделировать динамику молекулы ДНК как в В-, так и в А-форме, что, в свою очередь, позволяет получать численное согласие механических параметров с экспериментальными значениями, а также адекватно описывать поведение двойной спирали в широком спектре физических условий.

[1] Savin A.V., Mazo M.A., Kikot I.P., Manevitch L.I., Onufriev A. V. Heat conductivity of the DNA double helix // *Phys.Rev. B*, v. **83**, 2011, p. 245406.

[2] Кикоть И.П., Савин А.В., Зубова Е.А., Мазо М.А., Гусарова Е.Б., Маневич Л. И., Онуфриев А. В. Новая крупнозернистая модель ДНК // *Биофизика*, т. **56**, No. 3, 2011, стр. 396-402.