

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ОРГАНИЗАЦИИ И РАСЧЕТ ОПТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ЧАСТИЦ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ДИСПЕРСИЙ ДНК

Семенов С.В.

Национальный исследовательский центр "Курчатовский Институт"
Semenov_SV@nrcki.ru

В настоящее время интенсивно развивается бионанотехнология нуклеиновых кислот, ставящая своей целью создание пространственных наноконструкций с регулируемыми свойствами на основе молекул нуклеиновых кислот или их комплексов [1]. Одним из эффективных методов создания таких наноструктур является жидкокристаллический подход, при котором в результате фазового исключения двухцепочечных молекул ДНК из водно-солевых растворов полимеров происходит образование дисперсий нуклеиновых кислот. При этом необходимо решить важную задачу – определить характер упорядоченности молекул в этих молекулярных агрегатах.

Для решения этой проблемы целесообразно провести исследование оптической активности дисперсий, что позволяет получить важную информацию об их пространственной упаковке [2]. Наиболее ярким проявлением оптической активности является появление кругового дихроизма при частотах, совпадающих с частотой поглощения азотистых оснований ДНК.

Теоретическое исследование кругового дихроизма жидкокристаллических дисперсий ДНК проводится на основе теории поглощения электромагнитных волн большими молекулярными агрегатами [3,4]. Частицы моделируются дискретным набором поглощающих диполей, пространственное расположение которых, например геликоидальное в случае холестерика, соответствует способу упаковки молекул, составляющих комплекс. Развитый подход позволяет наряду с расчетом параметров оптической активности, отвечающей различным типам упорядоченности молекул ДНК в дисперсии также определять изменение оптических свойств, связанных с возмущением, обусловленным взаимодействием с наночастицами [4].

Литература.

1. Евдокимов Ю.М., Компанец О.Н., Успехи физ. наук Том 184 (6), С. 665-621 (2014).
2. Евдокимов Ю.М., Салянов В.И., Семенов С.В.и Скуридин С.Г., Жидкокристаллические дисперсии и наноконструкции ДНК, М. Радиотехника, 2008, 294 с; Yevdokimov Yu.M., Salyanov V.I., Skuridin S.G., Semenov S.V., Kompanets O.N., The CD Spectra of Double-Stranded DNA Liquid Crystalline Dispersions N.Y., Nova Science Publishers, 2011, 104 pages.
3. Keller D., Bustamante C. // J. Chem. Phys. 1980, V. 84, P. 2961-2971
4. Семенов С.В., Евдокимов Ю.М. // Биофизика 2015, Том 60, Вып. 2, С. 242-252.