

## ВЛИЯНИЕ ТЕРМОСТАТА НА ДИНАМИКУ ОТКРЫТЫХ СОСТОЯНИЙ ДНК

Гриневич А.А., Рясик А.А., Якушевич Л.В.

ИБК РАН, Россия, 142290, Пущино, ул. Институтская 3, +7(4967)739404,  
arc7an@gmail.com

Изучение динамики открытых состояний ДНК является важной проблемой теоретической биофизики. Известно, что они играют важную роль в процессах репликации и транскрипции. Однако на настоящий момент связь между динамикой открытых состояний и биологической активностью ДНК изучена недостаточно хорошо.

Для моделирования динамики открытых состояний мы использовали модифицированное уравнение синус-Гордона:

$$\begin{aligned} I(z) \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - K(z) a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V(z) \sin \phi = \\ = \frac{K(z) a^2}{R(z)} \left( 2 \frac{\partial \phi}{\partial z} \frac{\partial R}{\partial z} + \phi \frac{\partial^2 R}{\partial z^2} \right) - \lambda(z) \frac{\partial \phi}{\partial t} + \sqrt{2\lambda(t) k_B T} \zeta(t), \end{aligned} \quad (1)$$

которое учитывает неоднородность цепочки, диссипацию и воздействие случайной силы (термостат). Здесь  $\phi$  – угол отклонения азотистого основания от положения равновесия,  $z$  – координата,  $t$  – время,  $I$  – момент инерции азотистого основания,  $K$  – коэффициент жесткости сахарофосфатного остова,  $a$  – расстояние между соседними парами нуклеотидов,  $V$  – коэффициент, характеризующий энергию водородных связей,  $R$  – расстояние от центра масс азотистого основания до сахарофосфатного остова,  $\lambda$  – коэффициент трения,  $k_B$  – константа Больцмана,  $T$  – температура.

Уравнение было решено численно с помощью метода конечно-разностных схем. Построены траектории движения открытых состояний для искусственной последовательности, состоящей из нескольких однородных участков и для последовательности плазмиды рТТQ18, содержащей четыре функциональных области: промотор, терминатор и два гена. Рассчитаны вероятности перехода открытого состояния через границу между участками при воздействии на систему случайной силы.