

## ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛЫ ДНК С ПОМОЩЬЮ КРУПНОЗЕРНИСТОЙ МОДЕЛИ

Кикоть И.П., Мазо М.А., Савин А.В.

117461, Москва, Севастопольский пр-т, 73-70

Упаковка ДНК и взаимодействие ДНК с белками вызывает большой интерес, т.к. на малых масштабах молекула оказывается гораздо более гибкой, чем это можно было бы предположить. Кроме того, знание механических свойств необходимо при создании ДНК-содержащих наноустройств. В последнее десятилетие появилась возможность экспериментально измерять механические свойства одиночной молекулы ДНК, в то же время результаты таких экспериментов допускают различные интерпретации. В связи с этим особую роль начинает играть изучение механических свойств молекулы ДНК с помощью компьютерного моделирования.

Для решения данной задачи используется новая крупнозернистая модель ДНК, где каждая пара оснований представляется 12 зернами (Зубова Е.А., 2009). Взаимодействие зерен описывается системой потенциалов, разработанной на основе результатов полноатомного моделирования. Такой подход, с одной стороны, позволяет с большой точностью воспроизвести основные особенности подвижности молекулы, а с другой стороны, является достаточно эффективным с вычислительной точки зрения и позволяет рассматривать достаточно протяженные молекулы.

В работе моделируется растяжение молекулы ДНК при разных условиях: однородное растяжение различных последовательностей оснований при нулевой температуре и растяжение при комнатной температуре. Кроме того, ряд дополнительных расчетов позволяет изучить роль различных типов взаимодействий.

Одной из характерных особенностей молекулы ДНК является наличие участка постоянной силы на диаграмме "сила - растяжение" (Cluzel, 1996; Smith, 1996), природа которого до сих пор вызывает споры (Rouzina, 2001; Fu, 2010). Такая диаграмма, полученная в рамках нашей модели, хорошо согласуется с экспериментальными данными, а детальный анализ зависимости энергии однородного состояния от растяжения позволяет выдвинуть новое объяснение нетипичного характера зависимости силы от растяжения. Кроме того, проведенные расчеты дают возможность предсказать изменение структуры молекулы при растяжении, а также выявить влияние различных типов взаимодействий на формирование двойной спирали при механической нагрузке.

### Литература.

1. P. Cluzel et al. DNA: an extensible molecule // *Science*, 271, 1996. Стр 792-794.
2. S.B.Smith. Overstretching B-DNA: The Elastic Response of Individual Double-Stranded and Single-Stranded DNA Molecules. // *Science*, 271, 1996. Стр 795-799.
3. Rouzina I., Bloomfield V.. Force-Induced Melting of the DNA Double Helix Thermodynamic Analysis // *Biophys. J.*,80, 2001. Стр 882-893.
4. H. Fu et al. Two distinct overstretched DNA states. // *Nucleic Acids Research*,80, 2010. pp. 1-7.
5. Е.А. Зубова и др. «Крупнозернистая модель для анализа структурных переходов в молекуле ДНК» // Сб. статей XVI Всероссийской конф. «Структура и динамика молекулярных систем» Яльчик-2009, Часть 3, стр. 19.