

## **БИОМЕХАНИКА ДНК: ВРАЩАТЕЛЬНЫЕ КОЛЕБАНИЯ ОСНОВАНИЙ**

**Якушевич Л.В.**

Институт биофизики клетки РАН, Россия, 142290, Пущино Московской области,  
Институтская ул. 3, (4967)739252, yakushev@icb.psn.ru

Молекула ДНК – сложная биомеханическая система, включающая множество разнообразных видов движений. Среди них движения отдельных атомов, движения групп атомов (сахаров, фосфатных групп, оснований), движения фрагментов полинуклеотидных цепей.

В настоящей работе рассматривается один из видов внутренних движений ДНК - вращательные колебания оснований, образующих пару: Аденин-Тимин (АТ) или Гуанин-Цитозин (ГС). Эти колебания интересны тем, что вносят основной вклад в образование одиночных открытых состояний, которые, в свою очередь, играют важную роль в процессах белок-нуклеинового узнавания.

Для проведения расчетов используется фрагмент ДНК, состоящий из трех пар оснований. Предполагается, что основания центральной пары могут совершать вращательные колебания в горизонтальной плоскости ( $x$ ), ортогональной главной (вертикальной) оси молекулы ( $z$ ), в то время как основания двух крайних пар остаются неподвижными. В механической модели такого фрагмента ДНК основания имитируются маятниками, водородные взаимодействия – горизонтальными пружинками, связывающими маятники внутри пар, стэктнговые взаимодействия – вертикальными пружинками, связывающими маятники ближайших соседних пар. Сахаро-фосфатные цепочки считаются жесткими и неподвижными. Модель учитывает также спиральный характер структуры ДНК.

Для данной модельной системы построен лагранжиан и уравнения движения, имитирующие вращательные колебания оснований центральной пары. Найдены решения уравнений и построены траектории движения в конфигурационном пространстве.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 08-04-00197)