

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО ПОЛЯ ПЛАЗМИДЫ rPF1 И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ХАРАКТЕР ДВИЖЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ КОНФОРМАЦИОННЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ – КИНКОВ

Краснобаева Л.А.^{1,2}, Якушевич Л.В.³

¹ Сибирский государственный медицинский университет
Московский тр-т, 2, г. Томск, 634050, РФ

² Томский государственный университет

пр. Ленина, 36, г. Томск, 634034, РФ; e-mail: kla1983@mail.ru

³ Институт биофизики клетки РАН – обособленное подразделение ФГБУН «ФИЦ «Пушкинский научный центр биологических исследований РАН»

ул. Институтская, 3, г. Пущино, 142290, РФ; e-mail: kind-@mail.ru

Поступила в редакцию 04.07.2022. DOI: 10.29039/rusjbpс.2022.0490

Аннотация. В настоящей работе методы математического моделирования применяются для изучения особенностей динамики нелинейных конформационных возмущений – кинков в плазмиде rPF1. Движение кинков рассматривается как движение квазичастиц в потенциальном поле плазмиды. Поведение таких квазичастиц во многом определяется видом и характером этого поля. Для моделирования движения кинка вдоль плазмиды rPF1 использовалось уравнением МакЛафлина-Скотта. С помощью квазиоднородного приближения и блочного метода были рассчитаны энергетический профиль потенциального поля плазмиды rPF1 и построены 2D траектории движения кинков в области, расположенной между генами флуоресцентных белков Egfp и mCherry, при этом учитывались эффекты диссипации и воздействия постоянного торсионного поля. Показано, что существуют пороговые значения торсионного поля, ниже и выше которых поведение кинка существенно меняется: происходит переход от циклического движения кинка внутри области, расположенной между генами флуоресцентных белков Egfp и mCherry, к поступательному движению и выходу из этой области. Сделаны оценки пороговых значений. Показано, что они зависят от характера энергетического профиля вблизи области, расположенной между генами флуоресцентных белков Egfp и mCherry.

Ключевые слова: кинки ДНК, плазида rPF1, энергетический профиль, 2D траектория, торсионный момент

ВВЕДЕНИЕ

Плазида rPF1, созданная недавно генными инженерами [1], активно применяется для изучения интенсивности и направленности процесса транскрипции в различных последовательностях, которые для этой цели интегрируются в область, расположенную между генами флуоресцентных белков Egfp и mCherry. Изучение структурных и динамических свойств плазмиды rPF1 представляют научный интерес, которые помогут в перспективе прояснить вопрос о том, влияют ли структурные и динамические свойства самой плазмиды на результаты исследования функциональных свойств интегрируемых в нее последовательностей.

В данной работе исследуются динамические свойства нелинейных конформационных возмущений – кинков, активированных в молекуле ДНК [2]. Кинки активно используются для имитации открытых состояний в ДНК [3] и играют важную роль в процессах транскрипции [4-6], репликации [7,8], денатурации [9-11], а также переноса структурных изменений и информации по молекуле ДНК [12]. Поведение кинков во многом определяется видом и характером потенциального поля плазмиды. В отличие от предыдущих работ [13,14] в данной работе с помощью методов математической и теоретической физики были рассчитаны энергетические профили потенциального поля плазмиды, построены графики координаты и 2D траектории движения кинков в области, расположенной между генами флуоресцентных белков Egfp и mCherry, при этом учитывались эффекты диссипации и воздействия постоянного торсионного поля. Показано, что существуют пороговые значения торсионного поля, ниже и выше которых поведение кинка существенно меняется: происходит переход от циклического движения кинка внутри области, расположенной между генами флуоресцентных белков Egfp и mCherry, к поступательному движению и выходу из этой области. Сделаны оценки пороговых значений. Показано, что они зависят от характера энергетического профиля вблизи области, расположенной между генами флуоресцентных белков Egfp и mCherry.

ДЕТАЛИ СТРУКТУРЫ ПЛАЗМИДЫ rPF1

Полная нуклеотидная последовательность rPF1 была впервые опубликована в работе [15]. Особенность плазмиды rPF1 заключается в ее структуре, а именно: она содержит полиндромную область (участок 3), окруженную генами зеленого (участок 2) и красного (участок 4) белков, еще содержит ген устойчивости к канамицину (Kan) (участок 6) (рис. 1).

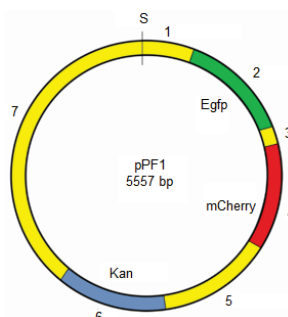


Рисунок 1. Схематическое изображение плазмиды pPF1. Ген зеленого белка (Egfp) - участок 2, ген красного белка (mCherry) - участок 4, и ген устойчивости к канамицину (Kan) – участок 6. S – точка, указывающая начало нумерации последовательности нуклеотидов

Если перенумеровать участки последовательности плазмиды, отвечающие генам и промежуточным областям между ними, начиная от точки S, получим 7 участков. Однако, разбиение последовательности на 7 участков не отражают кольцевой характер плазмиды. Чтобы учесть его, мы объединили участки справа и слева от точки S (1-й и 7-й участки) в единую область и назвали ее областью (7+1). В результате общее число участков уменьшилось на единицу и стало равным шести. Данные о координатах участков, числе аденинов N_A , тимининов N_T , гуанинов N_G , и цитозининов N_C и общее число оснований N на каждом участке представлены в таблице 1.

МОДЕЛЬ И МЕТОДЫ

Для моделирования движения кинка вдоль плазмиды pPF1 воспользуемся уравнением МакЛафлина-Скотта [16]:

$$\frac{dv_k(t)}{dt} = -\frac{\beta}{I} v_k(t) \left[1 - \left(\frac{v_k(t)}{C} \right)^2 \right] + \frac{M_0 \pi}{4\sqrt{IV}} \left[1 - \left(\frac{v_k(t)}{C} \right)^2 \right]^{\frac{3}{2}}, \quad (1)$$

где $v_k(t)$ – скорость кинка, $\beta = \alpha R^2$; α – коэффициент диссипации; R – расстояние от центра масс азотистого основания до сахаро-фосфатной цепочки; I – момент инерции основания; $C = (K' a^2 / I)^{1/2}$ – скорость звука; K' – константа, характеризующая крутильную жесткость сахаро-фосфатной цепочки; a – расстояние между ближайшими парами оснований, M_0 – постоянный внешний момент.

Точное аналитическое решение уравнения (1) было найдено в работе [17]:

$$v_k(t) = \frac{\left[\left(v_0 \gamma_0 - \frac{CM_0 \pi}{4\beta \sqrt{IV}} \right) \exp\left(-\frac{\beta}{I}(t-t_0) \right) + \frac{CM_0 \pi}{4\beta \sqrt{IV}} \right]}{\sqrt{1 + \left[\left(\frac{v_0}{C} \gamma_0 - \frac{M_0 \pi}{4\beta \sqrt{IV}} \right) \exp\left(-\frac{\beta}{I}(t-t_0) \right) + \frac{M_0 \pi}{4\beta \sqrt{IV}} \right]^2}}, \quad (2)$$

где t_0 – время начала движения кинка в рассматриваемом участке основной последовательности; v_0 – начальная скорость кинка, $\gamma = (1 - v_0^2 / C^2)^{-1/2}$.

Полная энергия и энергия покоя кинка определяются формулами:

$$E = E_0 \cdot \gamma, \quad (3)$$

$$E_0 = 8\sqrt{K'IV}. \quad (4)$$

В случае малых скоростей ($v_k \ll C$) формула (3) приобретает следующий вид:

$$E = 8\sqrt{K'IV} \cdot \gamma \cong E_0 + \frac{m v_k^2}{2}, \quad (5)$$

где $m = \frac{E_0}{2C^2}$ – масса кинка. Такой вид формулы (5) указывает на то, что кинк можно рассматривать как квазичастицу, обладающую определенной массой, скоростью и энергией.

Таблица 1. Детали структуры плазмиды pPF1

Номер участка (m)	Координаты участков	N_A	N_T	N_G	N_C	N
1+7	(1-332) + (3382-5557)	549	582	709	668	2508
2 (Egfp)	333..1049	102	172	240	203	717
3	1050-1133	28	28	14	14	84
4 (mCherry)	1134-1841	163	100	220	225	708
5	1842-2568	168	208	165	186	727
6 (Kan)	2569-3381	247	210	162	194	813

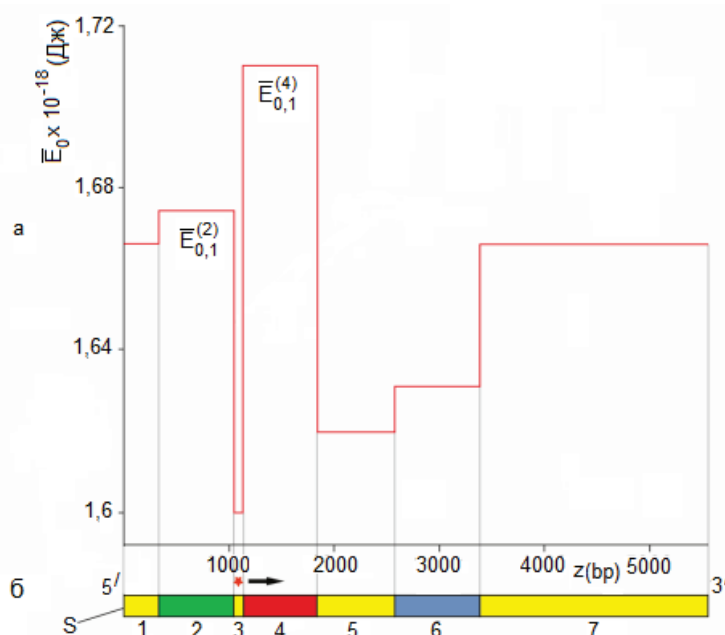


Рисунок 2. Энергетический профиль основной последовательности плазмиды pPF1 (а) и схематическое изображение кинка, движущегося в направлении 5’→3’ (б). Звездочка символизирует кинк. Стрелка указывает направление движения. Вертикальные вспомогательные серые линии указывают границы участков $\bar{E}_{0,1}^{(2)}$ и $\bar{E}_{0,1}^{(4)}$ – высоты энергетических барьеров, отвечающих генам зеленого и красного белков, соответственно

Энергетический профиль основной последовательности плазмиды ppf1. Для построения энергетического профиля мы рассчитали сначала усредненные значения основных динамических параметров плазмиды для каждого из шести участков, плазмиды pPF1 [18]. Формулы усреднения имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
 I_{n,i} &\rightarrow \bar{I}_i = I_A C_{A,i} + I_T C_{T,i} + I_G C_{G,i} + I_C C_{C,i}, \\
 R_{n,i} &\rightarrow \bar{R}_i = R_A C_{A,i} + R_T C_{T,i} + R_G C_{G,i} + R_C C_{C,i}, \\
 K'_{n,i} &\rightarrow \bar{K}'_i = K'_A C_{A,i} + K'_T C_{T,i} + K'_G C_{G,i} + K'_C C_{C,i}, \\
 k_{n,1-2} &\rightarrow \bar{k}_{1-2} = k_{A-T}(C_{A,1} + C_{T,2}) + k_{G-C}(C_{G,1} + C_{C,2}), \\
 \beta_{n,i} &\rightarrow \bar{\beta}_i = \beta_A C_{A,i} + \beta_T C_{T,i} + \beta_G C_{G,i} + \beta_C C_{C,i}.
 \end{aligned}
 \tag{6}$$

Здесь $C_{j,i} = N_{j,i}/N$ – концентрация оснований j -го типа в рассматриваемом участке i -ой цепи; $N_{j,i}$ число оснований j -го типа в этом участке; N – общее число оснований в рассматриваемом участке; $j = A, T, G, C, i = 1, 2$. А также вычислили значения энергий покоя кинков, активированных в каждом из этих участков: для каждого из шести участков основной $\bar{E}_{0,1}$ последовательности. Результаты расчетов представлены в таблице 2, а построенный энергетический профиль показан на рисунке 2.

Из рисунка 2а видно, что энергетический профиль основной последовательности плазмиды pPF1 содержит яму, которая полиндромному участку 3, расположенному между генами зеленого и красного белков. Образование кинка на этом участке наиболее вероятно, так как требует наименьших энергетических затрат.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ КИНКА В ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

Для моделирования начала движения кинка в потенциальной яме предположим, что в начальный момент времени кинк активировался в центре ямы ($z_{0,1} = 1092$ по) с нулевой начальной скоростью $v_{0,1} = 0$. Далее под воздействием постоянного торсионного момента M_0 , направленного от 5’ к 3’ концу основной

Таблица 2. Усредненные значения динамических параметров и энергии покоя, рассчитанные для шести участков основной последовательностей плазмиды pPF1

Номер участка	$\bar{I}_1 \times 10^{-44}$ (кг·м ²)	$\bar{K}'_1 \times 10^{-18}$ (Н·м)	$\bar{V}_1 \times 10^{-20}$ (Дж)	$\bar{E}_{0,1} \times 10^{-18}$ (Дж)
1+7	6,21	1,94	2,23	1,67
2 (Egfp)	6,16	1,92	2,28	1,67
3	6,21	1,96	2,04	1,60
4 mCherry)	6,30	1,96	2,32	1,71
5	6,06	1,91	2,14	1,62
6 (Kan)	6,18	1,95	2,13	1,63

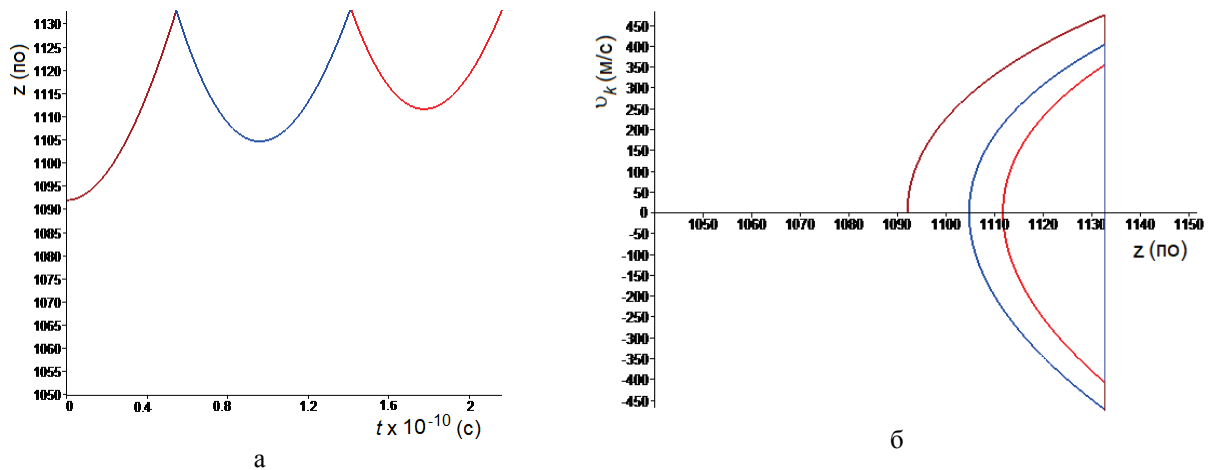


Рисунок 3. Временная зависимость координаты кинка (а), траектория кинка на фазовой плоскости $\{v_k, z\}$ (б). $M_0 = 2,50 \times 10^{-22}$ Дж, $v_0 = 0$

последовательности, кинк начнет движение направо, как это показано на рисунке 2б. На его пути, как видно из рисунка 2а, стоит энергетический барьер, расположенный справа от участка 3. Для преодоления этого барьера и продолжения движения, необходимо выполнить условие:

$$\bar{E}_{0,1}^{(3)} \cdot \gamma_{0,1}^{(3)} > \bar{E}_{0,1}^{(4)}, \quad (7)$$

где введены дополнительные верхние индексы в скобках, указывающие номер участка. Из условия (7) мы нашли формулу для расчета порогового значения скорости кинка:

$$v_{crit,right} = \bar{c}_1^{(3)} \sqrt{1 - \left(\frac{\bar{E}_{0,1}^{(3)}}{\bar{E}_{0,1}^{(4)}}\right)^2}. \quad (8)$$

Подставив значения параметров из таблицы 2 в формулу (8), мы получили $v_{crit,right} = 673,25$ м/с. Как будет показано ниже, этому пороговому значению скорости отвечает пороговое значение момента $M_{0,crit,right} = 4,95 \times 10^{-22}$ Дж.

Случай $M_0 < M_{0,crit,right}$. Мы построили графики координаты и 2D траектории движения кинков на фазовой плоскости $\{v_k, z\}$, когда постоянный внешний момент меньше порогового значения: $M_0 = 2,50 \times 10^{-22}$ Дж $< M_{0,crit,right}$. Определив координату кинка формулой

$$v_k = \frac{dz}{dt}, \quad (9)$$

был построен график временной зависимости координаты (рис. 3а) и траектории движения кинка на фазовой плоскости $\{v_k, z\}$ (рис. 3б). Для удобства фрагменты кривых, относящиеся к разным временным интервалам покрашены в разные цвета: коричневым в первом интервале, синим – во втором и красным – в третьем.

Из графика, представленного на рисунке 3а видно, что кинк, начав движение из центра 3-го участка ($z_{0,1} = 1092$ по) достиг правой границы ($z_{rb} = 1133$ по) в момент времени $t_{rb} = 5,45 \times 10^{-11}$ с (коричневая кривая). Подставив это значение времени в формулу (2) мы нашли скорость кинка у правой границы: $v_{rb} = 476,73$ м/с. Так как эта величина меньше порогового значения скорости $v_{crit,right} = 673,25$ м/с, кинк не смог преодолеть правую границу и отразился от нее. На графиках 3 а, 3 б, хорошо видно, что поведение кинка в первом интервале (0; $5,45 \times 10^{-11}$ с) включает плавное движение к правой границе и резкое вертикальное падение до значения -476,73 м/с.

Затем кинк снова начал плавное движение (синяя траектория), но уже в противоположном направлении. Из рисунка 3б видно, что, пройдя часть пути в направлении к левой границе, он плавно поворачивает к правой границе. Этот поворот на 180° объясняется нарушением баланса сил, способствующих и препятствующих движению кинка, в пользу последних. К моменту времени $1,42 \times 10^{-10}$ с кинк достиг правой границы. Его скорость на правой границе уменьшилась и стала равной 411,50 м/с. Так как эта величина меньше порогового значения скорости, то далее кинк снова отразился от правой границы и как видно из графиков 3 а, 3 б его скорость резко «упала вниз» до значения -411,50 м/с.

Следующий цикл движения кинка, включающий плавное движение от правой границы в направлении левой границы, плавный поворот на 180° не доходя левой границы, плавное движение в направлении правой границ и отражение от этой границы, показан на графиках 3а, 3б красным цветом. Очевидно, что такие циклы будут продолжаться. При этом значения скорости кинка на правой границе будут уменьшаться и в пределе стремиться к нулю.

Случай $M_0 > M_{0,crit,right}$. На рисунке 4 представлены графики временной зависимости координаты и 2D траектории движения кинков на фазовой плоскости $\{v_k, z\}$, когда постоянный внешний момент больше порогового значения: $M_0 = 6,50 \times 10^{-22}$ Дж $> M_{0,crit,right}$. Для удобства фрагменты кривых, относящиеся к разным

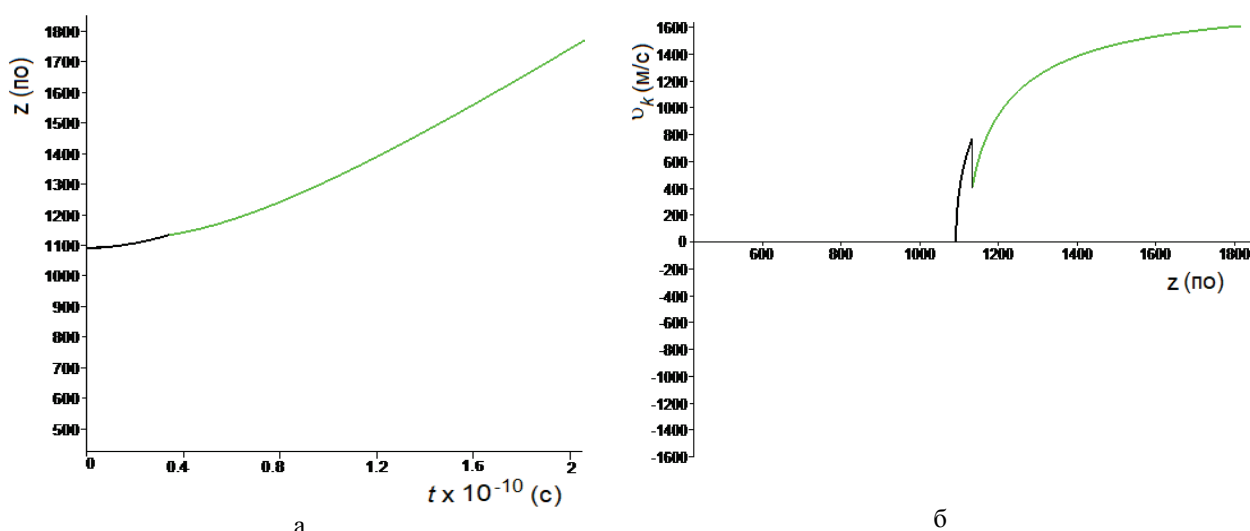


Рисунок 4. Временная зависимость скорости кинка (а), траектория кинка на фазовой плоскости $\{v_k, z\}$ (б). $M_0 = 6,50 \times 10^{-22}$ Дж, $v_0 = 0$

временным интервалам покрашены в разные цвета: черным цветом в первом интервале ($0; 3,42 \times 10^{-11}$ с), зеленым – во втором ($3,42 \times 10^{-11}$ с; $2,10 \times 10^{-10}$ с).

Из графика временной зависимости координаты, представленного на рисунке 4а, видно, что кинк, начав движение из центра 3-го участка ($z_{0,1} = 1092$ по) достиг правой границы ($z_{rb} = 1133$ по) в момент времени $t_{rb} = 3,42 \times 10^{-11}$ с (черная кривая). Подставив это значение времени в формулу (2) мы нашли скорость кинка у правой границы: $v_{rb} = 775,68$ м/с. Так как эта величина больше порогового значения скорости $v_{crit,right} = 673,25$ м/с, кинк смог преодолеть правую границу и войти в 4-ый участок (зеленая кривая). На рисунках 4 а, 4 б хорошо видно, что поведение кинка в интервале ($0; 3,42 \times 10^{-11}$ с) включает плавное движение к правой границе, преодоление ее и продолжение движения в 4-й области.

ОБСУЖДЕНИЕ И ВЫВОДЫ

В данной работе было промоделировано движение кинков в плазмиде pPF1. Для моделирования движения кинка вдоль плазмиды pPF1 использовалось уравнением МакЛафлина-Скотта с учетом эффектов диссипации и действия постоянного торсионного поля. Неоднородность плазмиды учитывалась с помощью квазиоднородного приближения, используя блочный метод последовательности плазмиды разбивалась на участки, включающих Egfp, mCherry и Kan, а также промежуточные участки между ними, и коэффициенты модельного уравнения усреднялись по каждому из этих участков. На основе рассчитанного энергетического профиля потенциального поля плазмиды было показано, что минимальная энергия для возбуждения кинка соответствует области между генами флуоресцентных белков Egfp и mCherry. Построены графики координаты и 2D траектории движения кинков в области, расположенной между генами флуоресцентных белков Egfp и mCherry. Показано, что существуют пороговые значения торсионного поля, ниже и выше которых поведение кинка существенно меняется: происходит переход от циклического движения кинка внутри области, расположенной между генами флуоресцентных белков Egfp и mCherry, к поступательному движению и выходу из этой области. Сделаны оценки порогового значения торсионного поля $M_{0,crit,right} = 4,95 \times 10^{-22}$ Дж

Следует, отметить, что все эти результаты были получены с рядом ограничений. Мы использовали упрощенную модель, учитывающую только один тип внутренних движений: угловые колебания азотистых оснований в одной из двух полинуклеотидных цепей ДНК, вторая цепочка моделируется только как среднее поле. Для нахождения аналитических решений использовали приближение Маклафлина-Скотта, справедливое только для случая малой диссипации. Однако мы полагаем, что разработанный нами подход может быть применим для более точных и сложных моделей для прогнозирования биологических характеристик природных последовательностей ДНК.

Список литературы / References:

1. Masulis I.S., Babaeva Z.Sh., Chernyshov S.V., Ozoline O.N. Visualizing the activity of *Escherichia coli* divergent promoters and probing their dependence on superhelical density using dual-colour fluorescent reporter vector. *Scientific Reports*, 2015, vol. 5, pp. 11449, doi: 10.1038/srep11449.
2. Zdravkovic S., Satarić M.V., Daniel M. Kink solitons in DNA. *International Journal of Modern Physics B.*, 2013, vol. 31, pp. 1350184.
3. Englander S.W., Kallenbach N.R., Heeger A.J., Krumhansl J.A., Litwin A. Nature of the open state in DNA structure. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 1980, vol. 77, pp. 7222-7226.
4. Clark D., Pazdernik N. *Biotechnology*, 2nd Edition. Academic Cell, 2015.

5. Zuo Y., Steitz T.A. A structure-based kinetic model of transcription. *Transcription*, 2017, vol. 8, pp. 1-8, doi: 10.1080/21541264.2016.1234821.
6. He Y., Yan C., Fang J., Inouye C., Tjian R., Ivanov I., Nogales E. Near-atomic resolution visualization of human transcription promoter opening. *Nature*, 2016, vol. 533, pp. 359-365, doi: 10.1038/nature17970.
7. Bailey L.J., Doherty A.J. Mitochondrial DNA replication: a PrimPol perspective. *Biochem Soc Trans*, 2017, vol. 45, pp. 513-529, doi: 10.1042/BST20160162.
8. Bleichert F., Botchan M.R., Berger J.M. Mechanisms for initiating cellular DNA replication. *Science*, 2017, vol. 355, pp. 215-222, doi: 10.1126/science.aah6317.
9. Sicard F., Destainville N., Manghi M. DNA denaturation bubbles: Free-energy landscape and nucleation/closure rates. *J. of Chemical Physics*, 2015, vol. 142, pp. 903-910, doi: 10.1063/1.4905668.
10. Shi C., Shang F., Zhou M., Zhang P., Wang Y., Ma C. Triggered isothermal PCR by denaturation bubble-mediated strand exchange amplification. *Chem. Commun.*, 2016, vol. 52, pp. 11551-11554, doi: 10.1039/C6CC05906F.
11. Singh A.R., Granek R. Manipulation of double-stranded DNA melting by force. *Phys. Rev. E*, 2017, vol. 96, pp. 032417-032422, doi: 10.1103/PhysRevE.96.032417.
12. Dwiputra D., Hidayat W., Zen F.P. Nonlinear dynamics of DNA bubble induced by site specific DNA-protein interaction. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2017, vol. 856, pp. 012005-012009, doi: 10.1088/1742-6596/856/1/011001.
13. Yakushevich L.V., Krasnobaeva L.A. Double energy profile of pBR322 plasmid. *AIMS Biophysics*, 2021, vol. 8, no. 2, pp. 221-232, doi: 10.3934/biophy.2021016.
14. Yakushevich L.V., Krasnobaeva L.A. Ideas and methods of nonlinear mathematics and theoretical physics in DNA science: the McLaughlin-Scott equation and its application to study the DNA open state dynamics. *Biophysical Reviews*, 2021, pp. 1-24, doi: 10.1007/s12551-021-00801-0.
15. Гриневич А.А., Масулис И.С., Якушевич Л.В. Математическое моделирование поведения транскрипционного пузыря в плазмиде pPF1 и ее модификациях. Связь между энергетическим профилем плазмиды и направлением транскрипции. *Биофизика*, 2021, т. 66, № 2, с. 248-258. [Grinevich A.A., Masulis I.S., Yakushevich L.V. Mathematical modeling of transcription bubble behavior in the pPF1 plasmid and its modified versions: the link between the plasmid energy profile and the direction of transcription. *Biophysics*, 2021, vol. 66, no. 2, pp. 248-258, doi: 10.31857/S0006302921020058. (In Russ.)]
16. McLaughlin D.W., Scott A.C. Perturbation analysis of fluxon dynamics. *Phys Rev A*, 1978, vol. 18, pp. 1652, doi: 10.1103/PhysRevA.18.1652.
17. Краснобаева Л.А., Якушевич Л.В. Влияние диссипации и внешнего поля на динамику локальных конформационных возмущений в ДНК. *Биофизика*, 2007, т. 52, с. 237-243. [Yakushevich L.V., Krasnobaeva L.A. Effects of dissipation and external fields on the dynamics of conformational distortions in DNA. *Biophysics*, 2007, vol. 52, pp. 237-243. (In Russ.)]
18. Yakushevich L.V., Krasnobaeva L.A. A new approach to studies of nonlinear dynamics of kinks activated in inhomogeneous polynucleotide chains. *Int. J. Nonl. Mech.*, 2008, vol. 43, pp. 1074-1081, doi: 10.1016/j.ijnonlinmec.2008.05.00.b0100.

FEATURES OF THE POTENTIAL FIELD STRUCTURE OF THE PPF1 PLASMID AND THEIR INFLUENCE ON THE CHARACTER OF MOTION OF NONLINEAR CONFORMATIONAL PERTURBATIONS – KINKS

Krasnobaeva L.A.^{1,2}, Yakushevich L.V.³

¹Siberian State Medical University,

Moskovskii trakt 2, Tomsk, 634050, Russia

²Tomsk State University,

pr. Lenina 36, Tomsk, 634050, Russia; e-mail: kla1983@mail.ru

³Institute of Cell Biophysics, Russian Academy of Sciences,

st. Institutskaya 3, Pushchino, 142290, Russia; e-mail: kind-@mail.ru

Received 04.07.2022. DOI: 10.29039/rusjbpс.2022.0490

Abstract. In this work, mathematical modeling methods are used to study the features of the dynamics of the nonlinear conformational perturbations, kinks, in the pPF1 plasmid. The motion of kinks is considered as the motion of quasiparticles in the potential field of the plasmid. The behavior of such quasiparticles is largely determined by the type and nature of this field. To simulate the movement of the kink along the pPF1 plasmid, the McLaughlin-Scott equation was used. Using the quasi-homogeneous approximation and the block method, the energy profile of the potential field of the pPF1 plasmid was calculated and 2D kink trajectories were constructed in the region located between the genes of the Egfp and mCherry fluorescent proteins, taking into account the effects of dissipation and exposure to a constant torsion field. It was shown that there are threshold values of the torsion field, below and above which the behavior of the kink changes significantly: there is a transition from the cyclic motion of the kink inside the region located between the genes of the fluorescent proteins Egfp and mCherry to the translational motion and exit from this region. Threshold values have been estimated. It was shown that they depend on the nature of the energy profile near the region located between the genes of the fluorescent proteins Egfp and mCherry.

Key words: DNA kinks, plasmid pPF1, energy profile, 2D trajectory, torsion moment.