

нами планируется провести серию экспериментов с другими соединениями, наличие водородной связи в которых является доказанным.

Список литературы / References:

1. Kostjukov V.V., Khomytova N.M., Hernandez Santiago A.A., Cervantes Taver A.-M., Salas Alvarado A, J., Evstigneev M.P. Parsing of the free energy of aromatic-aromatic stacking interactions in solution. *J. Chem. Thermodynamics*, 2011, vol. 43, pp. 1424-1434.
2. Kostjukov V.V., Khomytova N.M., Evstigneev M.P. Partition of thermodynamic energies of drug-DNA complexation. *Biopolymers*, 2009, vol. 91, no. 9, pp. 773-790.
3. Teplukhin A.V., Poltev V.I., Chuprina V.P. Dependence of the hydration shell structure in the minor groove of the DNA double helix on the groove width as revealed by Monte Carlo simulation. *Biopolymers*, 1991, vol. 31, pp. 1445-1453.
4. Teplukhin A.V., Zhurkin V.B., Poltev V.I. Monte Carlo modeling of DNA hydration. Poly(A)-water interaction in the major groove stabilizes the B₀ conformation. *Mol. Biol.*, 1996, vol. 30, pp. 75-84.
5. Li D.-W., Zhai W.-L., Li Y.-T., Long Y.-T. Recent progress in surface enhanced Raman spectroscopy for the detection of environmental pollutants. *Microchimica Acta*, 2014, vol. 181, pp. 23-43;
6. Bandarenka H., Artsemyeva K., Redko S., Panarin A., Terekhov S., Bondarenko V. Effect of swirl-like resistivity striations n+-type Sb doped Si wafers on the properties of Ag/porous silicon SERS substrates. *Phys. Status Solidi C*, 2013, vol. 1-4, DOI 10.1002/pssc.201200731.

ВЛИЯНИЕ ЭФФЕКТОВ ДИССИПАЦИИ НА ДИНАМИКУ КИНКА В ГЕНЕ IFNA 17

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

¹Сибирский государственный медицинский университет,

Московский тр-т 2, г. Томск, 634050, РФ,

²Томский государственный университет,

пр. Ленина 36, г. Томск, 634050, РФ

e-mail: kla1983@mail.ru

³Институт биофизики клетки РАН,

ул. Институтская 3, г.Пушино, 142290, РФ

e-mail: yakushev@icb.psn.ru

Аннотация. В настоящей работе мы исследовали влияние диссипации на динамику локальных конформационных возмущений – кинков – в гене IFNA17. Для моделирования внутренней подвижности молекулы ДНК было использовано уравнение синус-Гордон с дополнительным слагаемым, имитирующим эффекты диссипации. Для решения этого уравнения был применен метод МакЛафлина-Скотта. Коэффициенты модельного уравнения усреднялись по всей последовательности гена. В этом приближении были получены временные зависимости скорости, координаты и полной энергии кинка для трех различных значений начальной скорости кинка: 500 м/с, 800 м/с и 1500 м/с, которые не превышают скорости звука в ДНК.

Ключевые слова: ген IFNA17, кинк, метод МакЛафлина-Скотта, модифицированное уравнение синус-Гордона.

EFFECT OF DISSIPATION ON THE DYNAMICS OF KINKS IN THE GENE IFNA 17

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

¹Siberian State Medical University,

Moskovskii trakt, 2, Tomsk, 634050, Russia

²Tomsk State University,

36 Lenin av., Tomsk, 634050, Russia

e-mail: kla1983@mail.ru

³Institute of Cell Biophysics, Russian Academy of Sciences,

2 Institutskaya str., Pushchino, 142290, Russia

e-mail: yakushev@icb.psn.ru

Abstract. In this paper, we investigated the influence of dissipation on the dynamics of local conformational perturbations – kinks – in the IFNA17 gene. To simulate the internal mobility of the DNA molecule, we used the sine-Gordon equation with the additional term which imitated the effects of dissipation. To solve this equation, the method of McLaughlin and Scott was applied. The coefficients of the model equation were averaged over the entire sequence of the gene. In this approximation we obtained the time dependences of the kink velocity, coordinate and total energy for three different values of the initial kink velocities: 500 m/s, 800 m/s and 1500 m/s, which did not exceed the sound velocity in DNA.

Key words: gene IFNA17, kink, method of McLaughlin and Scott, modified sine-Gordon equation.

Введение. Ген, кодирующий интерферон альфа 17 (IFNA17), был идентифицирован Лауном и соавторами в 1981 году [1]. Расшифрована также последовательность нуклеотидов в этом гене [2]. Однако динамические свойства гена IFNA17 и, в частности, возможность возникновения и распространения локальных конформационных возмущений –

кинков – пока мало изучены. В нашей предыдущей работе [3] мы промоделировали движение кинка в гене IFNA17 без учета эффектов диссипации. В настоящей работе мы учитываем эти эффекты и исследуем, как они влияют на скорость, координату и полную энергию кинка.

Модель и методы исследования. Для моделирования внутренней подвижности гена IFNA17 используем уравнение синус-Гордон с дополнительным слагаемым в правой части, которое имитирует эффекты диссипации

$$\bar{I}_1 \phi_{tt} - \bar{K}'_1 a^2 \phi_{1zz} + \bar{V}_1 \sin \phi_1 = -\bar{\beta}_1 \phi_{1t}, \tag{1}$$

где $\phi_1(z,t)$ – угловое отклонение азотистого основания, расположенного в первой полинуклеотидной цепочке, от положения равновесия; \bar{I}_1 – момент инерции этого азотистого основания; \bar{K}'_1 – константа, характеризующая крутильную жесткость сахаро-фосфатной цепочки; a – расстояние между ближайшими парами оснований; \bar{V}_1 – константа, характеризующая взаимодействие между основаниями внутри пар, $\bar{\beta}_1(z) = \alpha \bar{R}_1^2$, α – коэффициент диссипации, \bar{R}_1 – расстояние от центра масс азотистого основания до сахаро-фосфатной цепочки. Черточка сверху означает усреднение по всей длине последовательности гена. Значения усредненных коэффициентов уравнения (1) представлены в таблице 1.

Для решения задачи (1) применим метод МакЛафлина-Скотта [4]. В рамках этого метода предполагается, что одно из решений уравнения (1) имеет вид кинка, движущегося со скоростью $v_{1,k}(t)$:

$$\phi_{1,k}(z,t) = 4 \arctg \{ \exp [(\bar{\gamma}_1(t) / \bar{d}_1) \cdot (z - v_{1,k}(t) \cdot t)] \}, \tag{2}$$

причем эта скорость определяется уравнением:

$$dv_{1,k}(t) / dt = -(\bar{\beta}_1 / \bar{I}_1) v_{1,k}(t) [1 - (v_{1,k}(t) / \bar{C}_1)^2], \tag{3}$$

где $\bar{\gamma}_1(t) = (1 - v_{1,k}^2(t) / \bar{C}_1^2)^{-1/2}$, $\bar{C}_1 = (\bar{K}'_1 a^2 / \bar{I}_1)^{1/2}$ – скорость звука, $\bar{d}_1 = (\bar{K}'_1 a^2 / \bar{V}_1)^{1/2}$ – размер кинка.

Таблица 1 – Параметры модели

Вид последовательности	$\bar{I}_1 \times 10^{-44}$ (кг·м ²)	$\bar{K}'_1 \times 10^{-18}$ (Нм)	$\bar{V}_1 \times 10^{-20}$ (Н/м)	$\bar{\beta}_1 \times 10^{-34}$ (Дж·с)
Ген IFNA17	6,11	1,93	2,08	3,49

Решение уравнения (3) для скорости кинка $v_{1,k}(t)$, которое было найдено в нашей работе [5], имеет вид:

$$v_{1,k}(t) = \frac{v_{01} \bar{\gamma}_{01} \exp \left(-\frac{\bar{\beta}_1}{\bar{I}_1} (t - t_0) \right)}{\sqrt{1 + \left(\frac{v_{01}}{\bar{C}_1} \bar{\gamma}_{01} \right)^2 \exp \left(-\frac{2\bar{\beta}_1}{\bar{I}_1} (t - t_0) \right)}}, \tag{4}$$

где $v_{01} = v_{1,k}(t_0)$ – скорость кинка в начальный момент времени t_0 , $\bar{\gamma}_{01} = (1 - v_{01}^2 / \bar{C}_1^2)^{-1/2}$.

Решение для координаты кинка $z_{1,k}(t)$, которую обычно определяют соотношением $v_{1,k}(t) = \frac{dz_{1,k}(t)}{dt}$, было найдено в работе [6]:

$$z_{1,k}(t) = z_{01} - \bar{C}_1 \frac{\bar{I}_1}{\bar{\beta}_1} \operatorname{arcsinh} \left(\frac{v_{01}}{\bar{C}_1} \bar{\gamma}_{01} \exp \left(-\frac{\bar{\beta}_1}{\bar{I}_1} (t - t_0) \right) \right) + \bar{C}_1 \frac{\bar{I}_1}{\bar{\beta}_1} \operatorname{arcsinh} \left(\frac{v_{01}}{\bar{C}_1} \bar{\gamma}_{01} \right), \tag{5}$$

где z_{01} – координата кинка в начальный момент времени t_0 .

Решение задачи для полной энергии кинка в рамках метода МакЛафлина-Скотта определим формулой:

$$\bar{E}_1(t) = \bar{E}_{01} (1 - v_{1,k}^2(t) / \bar{C}_1^2)^{-1/2}, \tag{6}$$

где $\bar{E}_{01} = 8\sqrt{\bar{K}'_1 \bar{V}_1}$ – энергия покоя кинка, а скорость $v_{1,k}(t)$ определяется формулой (6).

Результаты. На рисунках 1 – 3 представлены результаты расчета скорости, координаты и полной энергии кинка для трех различных значений начальной скорости кинка. При проведении расчетов были использованы формулы (4) – (6) и данные таблицы 1.

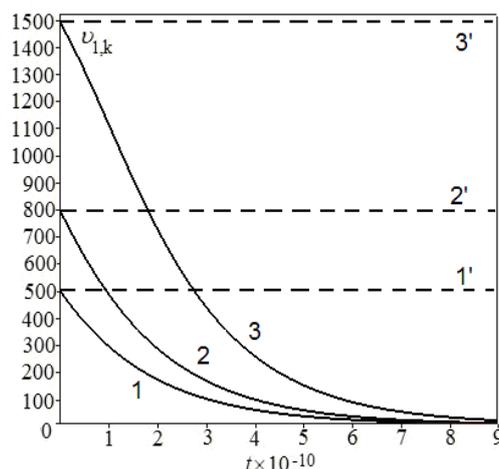


Рисунок 1 – Скорость кинка в гене IFNA17. Расчеты проводились с учетом диссипации (сплошные линии) и без учета диссипации (штриховые линии) и для трех значений начальной скорости: 500 м/с (линии 1 и 1'), 800 м/с (линии 2 и 2') и 1500 м/с (линии 3 и 3')

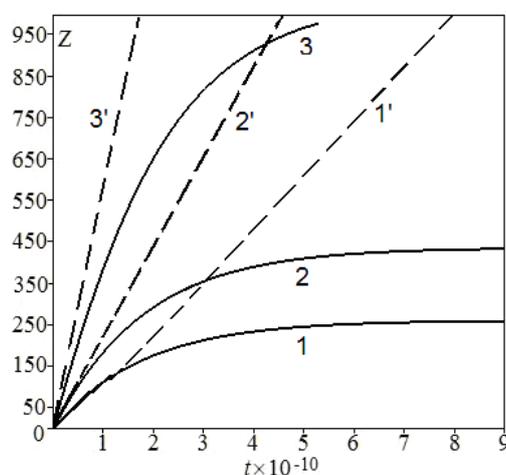


Рисунок 2 – Координата кинка в гене IFNA17. Расчеты проводились с учетом диссипации (сплошные линии) и без учета диссипации (штриховые линии) и для трех значений начальной скорости: 500 м/с (линии 1 и 1'), 800 м/с (линии 2 и 2') и 1500 м/с (линии 3 и 3')

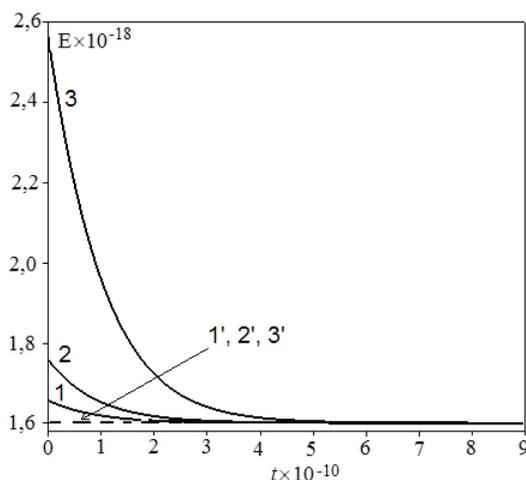


Рисунок 3 – Полная энергия кинка в гене IFNA17. Расчеты проводились с учетом диссипации (сплошные линии) и без учета диссипации (штриховые линии) и для трех значений начальной скорости: 500 м/с (линии 1 и 1'), 800 м/с (линии 2 и 2') и 1500 м/с (линии 3 и 3')

Обсуждение и выводы. Из графиков, представленных на рисунках (1) и (3), видно, что в отсутствие диссипации скорость кинка и его полная энергия сохраняют постоянное значение на всем временном интервале. Учет эффектов диссипации приводит к тому, что и скорость кинка, и его полная энергия убывают со временем, причем скорость кинка убывает до нуля, а энергия – до значения, равного значению энергии покоя.

Из рисунка 2 видно, что в отсутствие диссипации координата кинка монотонно растет на всем временном интервале. В случае учета эффектов диссипации координата кинка стремится к постоянному значению, отвечающему координате точки остановки кинка. С помощью формулы (5) мы рассчитали значения координат точки остановки для разных значений начальной скорости кинка:

$$z_{01}^{stop,500} = 263 \text{ по при } v_{01} = 500 \text{ м/с,}$$

$$z_{01}^{stop,800} = 438 \text{ по при } v_{01} = 800 \text{ м/с,}$$

$$z_{01}^{stop,1500} = 920 \text{ по при } v_{01} = 1500 \text{ м/с.}$$

Из этих результатов следует, что чем больше начальная скорость кинка, тем больший путь пройдет кинк до полной остановки.

Заметим, что все описанные выше результаты, получены в рамках упрощенной модели, которая учитывает подвижность азотистых оснований только в одной из двух полинуклеотидных цепей ДНК. При этом вторая цепочка моделируется лишь как среднее поле. Мы полагаем, однако, что предложенный выше подход к анализу особенностей движения кинка в гене IFNA17 можно применить и для других, более точных и сложных моделей динамики ДНК.

Список литературы / References:

1. Lawn R.M., Adelman J., Dul, T.J., Gross M., Goeddel D., Ullrich A. DNA sequence of two closely linked human leukocyte interferon genes. *Science*, 1981, vol. 212, pp. 1159-1162.
2. GenBank: Homo sapiens interferon alpha 17 (IFNA17), mRNA. URL: http://www.ncbi.nlm.nih.gov/nucore/NM_021268.2 (accessed December 23, 2016)
3. Якушевич Л.В., Краснобаева Л.А. Траектория движения кинка в гене, кодирующем интерферон alpha 17 (IFNA 17). *Актуальные вопросы биологической физики и химии*, 2016, т. 1, с. 136-140. Trajectory of kink movement in the interferon alpha 17 coding gene (IFNA 17). *Aktualnye problemy biologicheskoy fiziki i himii*, 2016, vol. 1, pp. 136-140 (In Russ.)]
4. McLaughlin D.W., Scott A.C. Perturbation analysis of fuxon dynamics. *Phys. Rev. A*, 1978, vol. 18, 1652 p.
5. Якушевич Л.В., Краснобаева Л.А. Влияние диссипации и внешнего поля на динамику локальных конформационных возмущений в ДНК. *Биофизика*, 2007, т. 52, № 2, с. 237-243. [Yakushevich L.V., Krasnobaeva L.A. Influence dissipation and external field on the dynamics local deformations in DNA. *Biophysics*, 2007, vol. 52, no. 2, pp. 179-184. (In Russ.)]
6. Yakushevich L.V., Grinevich A.A., Ryasik A.A. Simulation of a kink movement in homogeneous and heterogeneous DNA sequences taking into account the dissipation. *RJNAMIM*, 2014, vol. 29, pp. 197-204.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ МОЛЕКУЛ АКРИДИНОВОГО И ФЕНАНТРИДИНОВОГО КРАСИТЕЛЕЙ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

Барановский С.Ф.,¹ Чернышев Д.Н.,¹ Бучельников А.С.²

¹ Севастопольский государственный университет

ул. Университетская, 33, г. Севастополь 299053, РФ

² Белгородский государственный национальный исследовательский университет

ул. Победы, 85, г. Белгород 308015, РФ

e-mail: sfbar@yandex.ru

Аннотация. Методом спектрофотометрии изучена ассоциация разнородных молекул красителей в водном растворе. Проведено разложение спектра поглощения смеси красителей на индивидуальные компоненты, положение которых свидетельствует о смещении спектра разнородного ассоциата по отношению к полосам поглощения мономеров лигандов. По результатам разложения экспериментального спектра на составляющие с использованием квантово-механической теории получена количественная информация о структуре гетерокомплекса.

Ключевые слова: ассоциация, поглощение, краситель, димер, квантовая механика, спектрофотометрия, структурные параметры.