

Институт биологии Карельского научного центра РАН  
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова



**XV Симпозиум  
Петрозаводск**

**XV Симпозиум  
по межмолекулярному взаимодействию  
и конформациям молекул**

14–18 июня 2010 года,  
Петрозаводск

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСКРЫТИЯ ПАР АЗОТИСТЫХ ОСНОВАНИЙ  
МОЛЕКУЛЫ ДНК

Д.В. Якушевич<sup>1</sup>, С. Гапа<sup>2</sup>, Я. Аврейцевич<sup>2</sup>  
<sup>1</sup>Институт биофизики клетки РАН, Пущино  
<sup>2</sup>Технический университет, Лодзь, Польша

Раскрытие пар азотистых оснований ДНК – важнейший элемент процесса белок-нуклеинового узнавания. Динамика раскрытия одиночных пар во многом определяется вращательными колебаниями комплементарных оснований вокруг сахара-фосфатных цепочек. В настоящей работе для моделирования таких колебаний используется простая динамическая система, состоящая из двух связанных маятников, имитирующих комплементарные основания и осциллирующих в горизонтальной плоскости ( $x, y$ ), ортогональной к главной оси молекулы, параллельной оси  $z$ . Приводится Гамильтониан такой системы, уравнения движения, решения, полученные в аналитическом виде для случая малых отклонений маятников от положений равновесия и численно для случая больших угловых отклонений от положений равновесия. Сравниваются динамические характеристики колебаний пары АТ, состоящей из Аденина и Тимина, и пары ГЦ, состоящей из Гуанина и Цитозина.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ № 08-04-00197а) и Польского Научного Фонда (MISTRZ Program).