

дин, возрастающих как по величине, так и по их числу на единице длины лезвия.

Литература

1. Васильев Ю.В., Курицына Е.Ф., Лукьянов А.Е. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1997. №1. С. 73 (Moscow University Phys. Bull. 1997. No. 1).
2. Хартли Р.В.Л. // Теория информации и ее приложения. М., 1959. С. 5.
3. Харкевич А.А. Спектры и анализ. М., 1962.

4. Вудворд Ф.М. Теория вероятностей и теория информации с применениями в радиолокации. М., 1955.
5. Bastiaans M.J. // Advanced Topics in Shannon Sampling and Interpolation Theory / Ed. R.J. Marks II. N. Y., 1993. P. 1.
6. Васильев Ю.В., Курицына Е.Ф., Лукьянов А.Е. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1997. №4. С. 59 (Moscow University Phys. Bull. 1997. No. 4).

Поступила в редакцию
26.12.97

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 539.172

ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ПОДВИЖНОСТИ ГИДРАТИРОВАННОЙ ДНК

А. А. Опаленко, О. Г. Ширмин, М. А. Опаленко

(кафедра оптики и спектроскопии; кафедра физики твердого тела)

Экспериментально получено, что динамические характеристики воды и некоторых компонентов ДНК аддитивны. Найдены мёсбауэровские параметры f_R и $\langle u^2 \rangle$ для перехода «спираль–клубок», сопровождающего денатурацию ДНК.

Рэлеевское рассеяние мёсбауэровского излучения — это дифракция гамма-квантов на электронах, аналогичная рентгеновской дифракции. Но благодаря высокому энергетическому разрешению эффекта Мёсбауэра метод позволяет разделять упругое и тепловое диффузное рассеяние. В простейшем случае доля упруго рассеянного излучения (фактор Дебая–Валлера) может быть представлена в виде

$$f_R = \exp(-Q^2 \langle u^2 \rangle),$$

где $Q = 4\pi \sin \theta / \lambda$ — волновой вектор рассеяния, λ — длина волны кванта, θ — угол дифракции, $\langle u^2 \rangle$ — обобщенное среднеквадратичное смещение атомов, обусловленное колебательной и конформационной подвижностью.

Функциональные свойства, структура и динамика биополимеров определяются взаимодействием воды с биологическими макромолекулами. Суммарная доля упругого рассеяния f_R для гидратированного полимера складывается из факторов Дебая–Валлера для воды f_w и биополимера f_b :

$$f_R = [nA_b^2 f_b + (1-n)A_w^2 f_w] / [nA_b^2 + (1-n)A_w^2],$$

где n — доля молекул биополимера от общего числа молекул рассеивателя, $(1-n)$ — доля молекул воды, A_b^2 и A_w^2 — интенсивности рэлеевского рассеяния гамма-квантов на молекулах биополимера и воды. Можно записать f_R в виде

$$f_R = (f_b + h s f_w) / (1 + h s), \quad (1)$$

h — весовое соотношение воды и биополимера в образце (степень гидратации): $h = (1-n)M_w / nM_b$, $s = (A_w^2 M_b / A_b^2 M_w)$ — коэффициент, M_b и M_w — молекулярный вес биополимера и воды. При значениях $\lambda = 0,86 \text{ \AA}$ (для ^{57}Fe) и $2\theta = 12^\circ$ по этой формуле получается для большинства биополимеров [1] $f_R = (f_b + 1,21h f_w) / (1 + 1,21h)$, причем значение $s = 1,21$ — теоретическая величина.

Экспериментальная зависимость f_R от степени гидратации h для гидратированной ДНК (из тимуса телят) получена в работе [2] и приведена на рис. 1, причем она резко отличается от кривой, соответствующей выражению (1) при значениях $f_b = 0,88$ и $f_w = 0$. В работе [3] также исследовался раствор ДНК в воде и было получено значение $f_w = 0,4$. Для последнего значения f_w разрыв между экспериментом и расчетом будет еще больше. Следовательно, молекула ДНК взаимодействует с водой и при этом подвижность молекул значительно возрастает. Известно, что растворение ДНК в дистиллированной воде приводит к денатурации ДНК: жесткая двойная спираль расщепляется на гибкие одинарные нити [4].

Целью работы является исследование молекулярной подвижности отдельных компонент ДНК, а также гидратированной молекулы, находящейся в буферном растворе, сохраняющем молекулу от диссоциации.

Нами исследованы следующие компоненты ДНК: аденин — одно из четырех азотистых оснований, тимидин и гуанозин — нуклеозиды и нуклеотид —

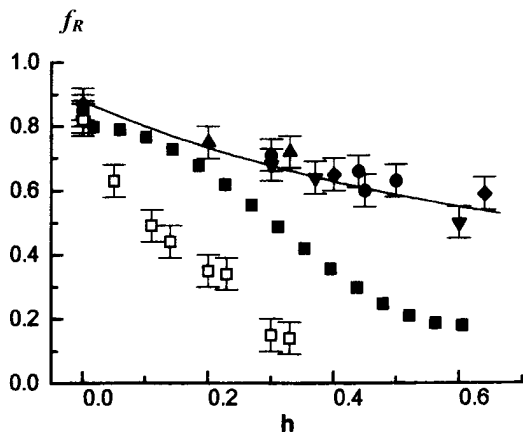


Рис. 1. Экспериментальная зависимость фактора Дебая-Валлера от степени гидратации: для аденина — ∇ , гуанозина — \blacklozenge , тимидина — \blacktriangle , аденозинмонофосфата — \bullet , ДНК в воде [2] — \blacksquare , ДНК в буфере — \square . Сплошная линия рассчитана по формуле (1)

аденозинмонофосфат. Эти биохимические соединения практически нерастворимы в дистиллированной воде при 25°C : растворимость аденина составляет 0,09 г на 100 г воды, гуанозина — 0,08 г и тимидина — 0,4 г, аденозинмонофосфат растворяется только в горячей воде [5]. Экспериментальные точки представлены на рис. 1. Они хорошо соответствуют расчету по формуле (1) при значении $s = 1$. Таким образом, результаты свидетельствуют об аддитивности динамических характеристик воды и данных биохимических соединений.

Зависимость подвижности молекул ДНК от степени гидратации была измерена в стандартном солевом цитратном буфере SSC (0,15 М NaCl и 0,015 М цитрата натрия, pH 7,0). Результаты приведены на рис. 1. На рис. 2 представлены величины $\langle u^2 \rangle$ для гидратированной молекулы ДНК из работы [2] и полученные нами для ДНК в буфере, причем значения f_b рассчитаны с учетом формулы (1) при $s = 1$.

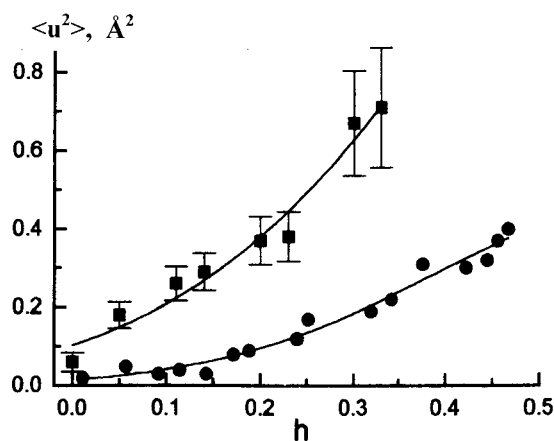


Рис. 2. Величина среднеквадратичного смещения атомов для ДНК в буфере — \blacksquare и ДНК в воде [2] — \bullet . Линии — аппроксимация по Гауссу

В эксперименте наблюдается увеличение подвижности молекул примерно вдвое для буфера по сравнению с чистой водой. Таким образом, получены мёссбауэровские параметры перехода «спираль-клубок», сопровождающего денатурацию ДНК.

Литература

1. Suzdalev I.P., Goldanskii V.I., Krupyanskiy Yu.F. et al. // *Hyperfine Interactions*. 1991. **66**. P. 177.
2. Kurinov I.V., Krupyanskiy Yu.F., Panchenko A.R. et al. // *Ibid.* 1990. **58**. P. 2355.
3. Albanese G., Deriu A., Cavatorta F., Rupprecht A. // *Biopolymers*. 1993. **33**. P. 633.
4. Уайт А., Хендлер Ф., Смит Э. и др. // *Основы биохимии*. М., 1981. Т. 1. С. 223.
5. Досон З., Эллиот Д., Эллиот У., Джонс К. *Справочник биохимика*. М., 1991.

Поступила в редакцию
27.04.98