

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,  $\lambda$  — длина волны кванта,  $\theta$  — 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  $^{57}\text{Fe}$ ) и  $2\theta = 12^\circ$  по этой формуле получается для большинства биополимеров [1]  $f_R = (f_b + 1,21 h f_w) / (1 + 1,21 h)$ , 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 —

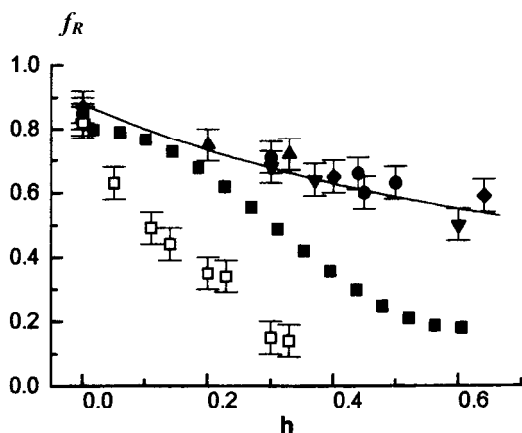


Рис. 1. Экспериментальная зависимость фактора Дебая-Валлера от степени гидратации: для аденина —  $\nabla$ , гуанозина —  $\blacklozenge$ , тимидина —  $\blacktriangle$ , аденозинмонофосфата —  $\bullet$ , ДНК в воде [2] —  $\blacksquare$ , ДНК в буфере —  $\square$ . Сплошная линия рассчитана по формуле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

аденозинмонофосфат. Эти биохимические соединения практически нерастворимы в дистиллированной воде при  $25^\circ\text{C}$ : 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  $s = 1$ .

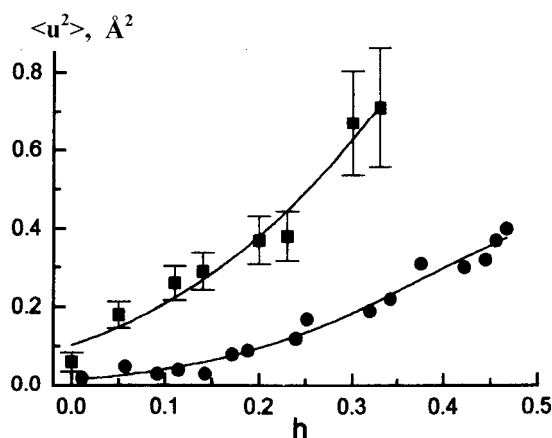


Рис. 2. Величина среднеквадратичного смещения атомов для ДНК в буфере —  $\blacksquare$  и ДНК в воде [2] —  $\bullet$ . Линии — аппроксимация по Гауссу

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