

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Благой Ю. П., Корнилова С. В., Сохан В. И.* Изучение изменения характеристической вязкости ДНК при взаимодействии с ионами Cu^{2+} и Mn^{2+} // Молекуляр. биология.— 1982.—16, № 1.— С. 210—216.
2. *Bivalent metal ion effects on chain stiffness and excluded volume of DNA / Yu. P. Blagoi, S. V. Kornilova, A. G. Shkorbatov, S. A. Egupov* // Stud. biophys.— 1985.—108, N 1.— P. 17—24.
3. *Reuben J., Gabbay E.* Binding of manganese (II) to DNA and the competitive effects of metal ions and organic cations. An electron paramagnetic resonance study // Biochemistry.— 1975.—14, N 6.— P. 1230—1235.
4. *Kornilova S. V., Blagoi Yu. P., Shkorbatov A. G.* Metal ion effect on molecular sites and intermolecular interaction in DNA // Water and ions in biol. syst.— New York: Plenum press, 1985.—856 p.
5. *Исследование влияния ионов Mn^{2+} и Mg^{2+} на конформацию молекулы ДНК / Н. А. Косьяненко, Г. Сэзьман-Хусейн Соса, В. Н. Уверский, Э. В. Фрисман* // Молекуляр. биология.— 1987.—21, № 1.— С. 140—144.
6. *Clement R. M., Strum J., Daune M. P.* Interaction of metallic cations with DNA. 6. Specific binding of Mg^{2+} and Mn^{2+} // Biopolymers.— 1973.—12, N 2.— P. 405—421.
7. *Фрисман Э. В.* Оптическое и гидродинамическое поведение ДНК и ее комплексов с биологически активными молекулами // IV Междунар. биофиз. конгр.: Тез. докл.— Пущино, 1973.— Т. 1.— С. 301.
8. *Hagerman P. I.* Investigation of the flexibility of DNA using transient electric birefringence // Biopolymers.— 1983.— 20, N 4.— P. 1503—1535.
9. *Франк-Каменецкий М. Д.* Флуктуационная подвижность ДНК // Молекуляр. биология.— 1983.—17, № 3.— С. 539—652.
10. *Ross P. D., Scruggs R. L.* Viscosity study of DNA. II. The effect of simple salt concentration of the viscosity of high-molecular weight DNA and application of viscometry to the study of DNA isolated from T1 and T5 bacteriophage mutants // Biopolymers.— 1968.—6, N 4.— P. 1005—1018.
11. *Влияние ионов металлов на структуру ДНК разного молекулярного веса / Ю. П. Благой, С. В. Корнилова, В. А. Сорокин, А. Г. Шкорбатов* // Stud. biophys.— 1986.—114, N 1/3.— С. 263—268.
12. *Благой Ю. П., Сорокин В. А., Валеев В. А.* Спектральное исследование связывания оснований ДНК с ионами магния и кальция // Молекуляр. биология.— 1980.—14, № 3.— С. 595—605.
13. *Zimmer Ch.* Binding von Divalent Metallionen un Nucleinsäuren und Wirkungen auf die Konformation der Deoxyribonucleinsäure // Zeitschrift Chem.— 1971.—11, N 12.— P. 441—458.
14. *Лифшиц И. М., Гросберг А. Ю., Хохлов А. Р.* Объемные взаимодействия в статистической физике полимерных макромолекул // Успехи физ. наук.— 1979.—127, № 3.— С. 353—388.
15. *Manning G. S.* The molecular theory of polyelectrolyte solutions with applications to the electrostatic properties of polynucleotides // Quart. Rev. Biophys.— 1978.—11, N 2.— P. 179—246.
16. *Лукашин А. В., Анишелевич В. В., Франк-Каменецкий М. Д.* Современное состояние теории сильно заряженных полиэлектролитов типа ДНК.— Пущино, 1985.— 29 с.
17. *Расчет характеристической вязкости синтетических и биологических полиэлектролитов различной жесткости / С. В. Слонцкий, Э. В. Фрисман, А. К. Валеев и др.* // Молекуляр. биология.— 1980.—14, № 3.— С. 484—495.
18. *Reinert K. E., Geller K.* Interactions of different substances with polyelectrolyte DNA // Stud. biophys.— 1968.—30, N 10.— С. 65—73.

Физ.-техн. ин-т низких температур
АН УССР, Харьков

Получено 11.05.89

УДК 577.963.32;539.199

С. Н. Волков, А. М. Косевич, Г. Е. Вайнреб

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ

НИЗКОЧАСТОТНЫХ КОЛЕБАНИЙ МАКРОМОЛЕКУЛ ДНК

Исследованы колебания структурных элементов полинуклеотидной цепи относительно равновесной конформации двутяжевых ДНК. В рассмотрение включены относительные движения нуклеотидов, связанных попарно водородными связями, изгибания полинуклеотидных цепей и внутринуклеозидная подвижность. Выполнен анализ нормальных колебаний двутяжевой цепи и определена структура низкочастотного спектра колебаний ДНК. Используя теоретические результаты и их согласие с данными спектроскопии комбинационного рассеяния (КР), предложена интерпретация наблюдаемых особенностей в спектрах низкочастотных колебаний ДНК.

Исследование низкочастотных колебаний ($\omega < 200 \text{ см}^{-1}$) биологических макромолекул представляет значительный интерес. В низкочастотном диапазоне проявляются движения структурных элементов макромолекулы, связанных межмолекулярными взаимодействиями в рамках определенной конформации биополимера. Как правило, низкочастотные колебания охватывают всю структуру макромолекулы и характеризуют ее конформационное состояние в целом. Имея относительно большую амплитуду смещений и являясь предшественниками конформационных переходов, эти колебания могут играть важную роль в актах биологического функционирования макромолекул.

Настоящая работа посвящена изучению низкочастотных колебаний макромолекул ДНК. На важность исследования колебаний ДНК в низкочастотном диапазоне впервые обращено внимание в работе Малеева [1]. Систематическое изучение низкочастотных колебаний ДНК началось с 1981 г. с помощью КР-спектроскопии [2, 3]. В настоящее время получены результаты для растворов, пленок и волокон ДНК в различных условиях среды [2—9]. Характерные колебания обнаружены также в ряде биологических объектов, в состав которых входит ДНК [7]. Существуют экспериментальные доказательства того, что наблюдаемые колебания носят внутриспиральный характер [8, 9].

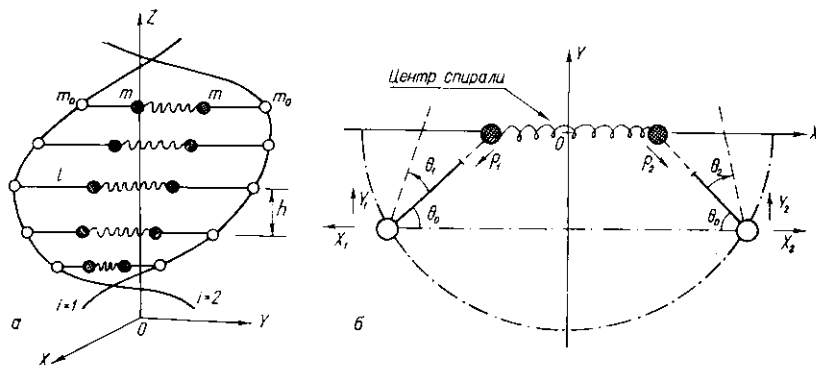
Несмотря на значительное количество полученных результатов, однозначной трактовки низкочастотных спектров КР ДНК еще не дано. Имевшиеся к началу экспериментальных работ расчеты колебательных спектров ДНК, выполненные с помощью валентно-оптического метода, указывали на присутствие в низкочастотном диапазоне колебаний с растяжением водородных связей в парах оснований [10, 11]. Однако эти расчеты дают на порядок величины большее наблюдаемых число колебательных полос для низкочастотного спектра ДНК, которые к тому же из-за неоднозначности выбора силовых постоянных [11] трудно соотносить с экспериментальными данными. С другой стороны, развитые в работах [12, 13] упрощенные модели динамики ДНК не позволили достичь уровня, достаточного для интерпретации эксперимента.

В работах [14, 15] для описания низкочастотной подвижности макромолекул ДНК предложен подход, базирующийся на представлении динамики кристаллической решетки. Макромолекула рассматривалась как двутяжевая цепь жестких нуклеозидов, связанных попарно водородными связями. Принимая во внимание конфигурационные особенности ДНК, в модели учитывали качания нуклеозидов вокруг цепей остова и совместные смещения нуклеозидов и масс остова. Параметры модели были рассчитаны по рентгеноструктурным данным двуспиральных ДНК, а силовые постоянные определены по результатам конформационных расчетов. Полученные результаты [14, 15] воспроизводят основные черты экспериментального спектра ДНК, однако ввиду использования приближения жесткого нуклеозида носят предварительный характер. Для интерпретации эксперимента необходимо выяснить роль и место внутринуклеозидной подвижности тем более, что, согласно [1], внутринуклеозидные колебания могут лежать в изучаемом частотном диапазоне.

В настоящей работе развита модель конформационной динамики ДНК, учитывающая, что нуклеозид не является жестким, т. е., кроме растяжения водородных связей в парах оснований и изгибания остова, рассматривается также внутринуклеозидная подвижность (рисунок). Как известно, нуклеозид может менять свою конформацию за счет изменения формы сахара и торсионного угла гликозидной связи. Эти изменения происходят коррелировано [16] и, следовательно, могут быть описаны одной независимой переменной. Учитывая, что в рамках развитаемого подхода при изменении конформации сахара наиболее существенно меняется приведенная длина нуклеозида l [14, 15], примем за переменную, определяющую внутринуклеозидную подвижность, величину: $\rho_i = l - l_i$. Здесь l — равновесная для данной конформации двойной спирали приведенная длина нуклеозида. Для полноты рассмотре-

ния поперечных степеней свободы наряду со смещениями нуклеозида и остова по X и качаниями нуклеозида вокруг цепей остова (Θ) учтем также подвижность нуклеозида и остова по Y -компоненте (рисунок). Включение смещений по Y не вносит по сравнению с моделью [14, 15] качественных особенностей в спектр колебаний макромолекулы, но представляет интерес для возможных приложений. Ограничение в теории поперечными смещениями достаточно для описания колебаний ДНК в низкочастотном диапазоне, что следует из результатов поляризационных измерений спектров КР ориентированных образцов [4].

Запишем энергию малых смещений двуэлазевой макромолекулы в соответствии с описанной моделью конформационной подвижности.



Модель низкочастотной подвижности макромолекулы ДНК: a — общий вид; b — расположение масс нуклеозидов (m) и остова (m_0) в плоскости пар оснований; стрелками указаны смещения

Model of low-frequency mobility of DNA macromolecule: a — general view; b — position of nucleoside masses (m) and backbone masses (m_0) in base pair plane; the arrows indicate displacements

Сделаем это в континуальном приближении, дающем возможность сравнить результаты теории и эксперимента. Кинетическая энергия системы может быть представлена в виде:

$$K = \sum_{i=1,2} \int \frac{dz}{2h} [M(\dot{X}_i^2 + \dot{Y}_i^2) + m(l^2\dot{\Theta}_i^2 + \dot{\rho}_i^2 + 2l_a\dot{\Theta}_i\dot{X}_i + 2l_b\dot{\Theta}_i\dot{Y}_i + 2b\rho_i\dot{X}_i - 2a\rho_i\dot{Y}_i)], \quad (1)$$

где $a = \sin \Theta_0$, $b = \cos \Theta_0$, $l_a = l \sin \Theta_0$, $l_b = l \cos \Theta_0$, h — расстояние между соседними звеньями двойной цепи, индекс i нумерует цепи двуэлазевой макромолекулы, \dot{X} , \dot{Y} , $\dot{\Theta}$, $\dot{\rho}$ — производные по времени соответствующих переменных.

Потенциальная энергия системы для малых смещений выглядит следующим образом:

$$U = \int \frac{dz}{dh} \left\{ \alpha \delta^2 + \sum_{i=1,2} [\beta \Theta_i^2 + \epsilon \rho_i^2 + fh^2 (\Theta_i')^2 + g_1 h^2 (X_i')^2 + g_2 h^2 (Y_i')^2 + g_3 h^2 (\rho_i')^2] \right\}. \quad (2)$$

Здесь α , β , ϵ , f , g — силовые постоянные взаимодействий, соотнесенные с соответствующими переменными; δ — изменение расстояния между нуклеозидами в комплементарных парах (длины водородных связей); X' , Y' , Θ' , ρ' — производные по z .

В рассматриваемом приближении малых смещений выражение для δ может быть записано в виде

$$\delta \approx l_a (\Theta_1 + \Theta_2) + X_1 + X_2 + b(\rho_1 + \rho_2). \quad (3)$$

Введем для упрощения записи переменные

$$\begin{aligned} X &= X_1 + X_2; & Y &= Y_1 + Y_2; & \Theta &= \Theta_1 + \Theta_2; & \rho &= \rho_1 + \rho_2; \\ x &= x_1 - x_2; & u &= y_1 - y_2; & \xi &= \Theta_1 - \Theta_2; & \eta &= \rho_1 - \rho_2. \end{aligned} \quad (4)$$

Используя выражения для энергии (1) и (2) с помощью формализма Лагранжа — Эйлера, приходим к двум системам линейных дифференциальных уравнений для переменных (4):

$$\begin{cases} fh^2\ddot{\Theta} - m l_a^2 \ddot{\Theta} - m(l_a \ddot{X} + l_b \ddot{Y}) - 2l_a \alpha (X + l_a \Theta + b\rho) - \beta \Theta = 0; \\ g_1 h^2 X'' - M \ddot{X} - m(l_a \ddot{\Theta} + b\dot{\rho}) - 2\alpha (X + l_a \Theta + b\rho) = 0; \\ g_2 h^2 Y'' - M \ddot{Y} - m(l_b \ddot{\Theta} - a\dot{\rho}) = 0; \\ g_3 h^2 \rho'' - m \dot{\rho} - m(b \dot{X} - a \dot{Y}) - 2\alpha b (X + l_a \Theta + b\rho) - \varepsilon \rho = 0. \end{cases} \quad (5)$$

$$\begin{cases} fh^2 \ddot{\xi} - m l_a^2 \ddot{\xi} - m(l_a x + l_b u) - \beta \xi = 0; \\ g_1 h^2 x'' - M \ddot{x} - m(l_a \ddot{\xi} + b \dot{\eta}) = 0; \\ g_2 h^2 u'' - M \ddot{u} - m(l_b \ddot{\xi} - a \dot{\eta}) = 0; \\ g_3 h^2 \eta'' - m \dot{\eta} + m(a \dot{u} - b \dot{x}) - \varepsilon \eta = 0. \end{cases} \quad (6)$$

Как видно из (5) и (6), первая система переходит во вторую при $\alpha \rightarrow 0$ либо $\delta \rightarrow 0$. Поэтому фактически достаточно изучить решения первой системы, а затем, приравняв α к нулю, получим соответствующие результаты для второй.

Найдем нормальные колебания системы. Будем искать решения уравнений (5) и (6) в виде плоских волн: $r = \tilde{r} \exp[i(\omega t - kz)]$, где \tilde{r} — амплитуда соответствующей переменной, ω — циклическая частота, k — волновой вектор. В этом случае из условия совместности решений систем уравнений следуют дисперсионные отношения, определяющие спектр колебаний макромолекулы. В длинноволновом приближении ($k \rightarrow 0$) для системы (5) имеем дисперсионное соотношение вида:

$$\begin{aligned} \omega^2 \left[\omega^6 - \omega^4 \frac{M}{m_0} (\alpha_0 + \beta_0 + \varepsilon_0) + \omega^2 \frac{M^2}{m_0^2} (\alpha_0 \varepsilon_0 q + \right. \\ \left. + \alpha_0 \beta_0 p + \beta_0 \varepsilon_0) - \frac{M^2 m}{m_0^3} \alpha_0 \beta_0 \varepsilon_0 \right] = 0, \end{aligned} \quad (7)$$

а из системы уравнений (6) соответственно:

$$\omega^4 \left(\omega^2 - \varepsilon_0 \frac{M}{m_0} \right) \left(\omega^2 - \beta_0 \frac{M}{m_0} \right) = 0. \quad (8)$$

Здесь обозначено: $\alpha_0 = 2\alpha m_0 / Mm$; $\beta_0 = \beta / ml^2$; $\varepsilon_0 = \varepsilon / m$; $m_0 = M - m$; $q = a^2 + mb^2 / M$; $p = b^2 + ma^2 / M$. Из выражений (7) и (8) видно, что в изучаемой модели содержатся пять оптических и три акустические моды.

Выясним взаимное расположение оптических мод в спектре при $k \rightarrow 0$. Принимая во внимание соотношения между структурными пара-

метрами модели [14, 15], можно показать, что для макромолекул типа ДНК выполняется

$$p \approx 1 \text{ и } m/qM \approx 1. \quad (9)$$

Учитывая (9), из уравнения (7) находим:

$$\omega_{1,2}^2 \approx \frac{M}{2m_0} [\alpha_0 + \varepsilon_0 \pm \sqrt{(\alpha_0 + \varepsilon_0)^2 - 4q\alpha_0\varepsilon_0}], \quad \omega_3^2 \approx \frac{M}{m_0} \beta. \quad (10)$$

Из уравнения (8) следует:

$$\omega_4^2 = \varepsilon_0 M/m_0 \text{ и } \omega_5^2 = \frac{M}{m_0} \beta_0 \approx \omega_3^2. \quad (11)$$

Зная, что в рассматриваемых макромолекулах обычно $\beta_0 \ll \alpha_0$, ε_0 и $\alpha_0 \sim \varepsilon_0$, получаем для спектра длинноволновых колебаний изучаемой системы:

$$\omega_1 > \omega_4 > \omega_2 > \omega_5 \approx \omega_3. \quad (12)$$

Существенно, что в предположении абсолютной жесткости нуклеозидов ($\varepsilon \rightarrow \infty$) дисперсионные уравнения (7) и (8) с точностью до постоянных переходят в результаты, полученные ранее для модели жестких нуклеозидов. Так же, как в [14, 15], наиболее низколежащая частота из-за структурных особенностей оказывается двукратно вырожденной. Отметим, что при учете внутринуклеозидной подвижности более высокочастотная (в модели жестких нуклеозидов) ветвь колебаний превращается в полосу ($\omega_1, \omega_4, \omega_2$).

Для анализа конформационных колебаний макромолекулы ДНК важно знать соотношения амплитуд колебаний. Их можно получить из систем (5) и (6) после подстановки решений в виде плоских волн. В результате имеем:

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{X}}{l\tilde{\Theta}} &= a \left(\frac{b^2}{a^2} W + 1 \right) \frac{m\omega^2 - 2\alpha}{2\alpha - M\omega^2}; & \frac{\tilde{x}}{l_{\xi}} &= -a \frac{m}{M} \left(\frac{b^2}{a^2} W + 1 \right); \\ \frac{\tilde{Y}}{l\tilde{\Theta}} &= b \frac{m}{M} (W - 1); & \frac{\tilde{u}}{l_{\xi}} &= b \frac{m}{M} (W - 1); \\ \frac{\tilde{\rho}}{l\tilde{\Theta}} &= \frac{b}{a} W; & \frac{\tilde{\eta}}{l_{\xi}} &= \frac{b}{a} W, \end{aligned} \quad (13)$$

где $W = (\omega^2 - \omega_3^2)/(\omega^2 - \omega_4^2)$. Из соотношений (13) видно, что колебания в четвертой ветви происходят практически без качаний по ξ , так как при значении частоты колебаний, равном ω_4 , величина W стремится к бесконечности. А при $\omega \approx \omega_3$ или ω_5 $W \approx 0$. Следовательно, в третьей и пятой ветвях колебания происходят без участия внутринуклеозидных степеней свободы ($\tilde{\rho} \approx \tilde{\eta} \approx 0$). В некоторых ветвях колебания происходят без существенного растяжения водородных связей. Для ветвей ω_4 и ω_5 это очевидно; для ветви ω_3 — вытекает из рассмотрения соотношений (3), (9) и (12) при учете $W \approx 0$ и $\rho \approx 0$.

Становится понятной граница использования приближения жесткого нуклеозида. Так, из приведенных данных видно, что при описании нижайших ветвей колебаний (ω_3 и ω_5) макромолекулы такое приближение вполне оправданно и не требует учета более высокоэнергетичных движений и, в частности, внутринуклеозидной подвижности.

Для сравнения теории с экспериментом вычислим значения частот оптических ветвей колебаний макромолекулы при $k=0$. Рассмотрим результаты для В-формы ДНК. При расчете воспользуемся полученными ранее параметрами модели ($l \approx 0,49$ нм, $\Theta_0 \approx 28^\circ$, $m=199$ а. е. м., $M=308$ а. е. м.), а также значениями силовых постоянных, оцененных

нами по данным конформационных расчетов ($\alpha \approx 80$ ккал/(моль·А²), $\beta \approx 40$ ккал/моль) [14, 15]. Существенной трудностью является выбор постоянной ϵ , характеризующей мягкость нуклеозида, связанную с возможностью конформационной перестройки сахара и изменением торсионного угла гликозидной связи. Оценка ϵ может быть произведена, исходя из величины барьера перехода между двумя возможными состояниями нуклеозида в В- и А-формах ДНК [17]. Более точное значение можно получить из соотношения теории и эксперимента, поскольку из выражения (11) следует $\epsilon = \omega_4^2 (mm_0/M)$. Учитывая, что $\omega_2 < \omega_4 < \omega_1$, отнесем колебание с ω_4 к центру наблюдаемой в спектрах В-ДНК полосы около 85 см⁻¹ [3—6], т. е. будем считать, что $\omega_4 \approx 85$ см⁻¹, откуда получаем: $\epsilon \approx 43$ ккал/(моль·А²). Это значение хорошо соответствует теоретической оценке [17].

Результаты расчетов спектра низкочастотных колебаний В-формы ДНК приведены в табл. 1, содержащей также экспериментальные данные [2—8]. Сравнение результатов, приведенных в табл. 1, показывает достаточно хорошее согласие теории и эксперимента. Действительно, выполненный расчет в соответствии с экспериментом свидетельствует о наличии в низкочастотном спектре КР В-ДНК двух областей колебаний: довольно узкого пика и более высокочастотной широкой полосы. При сравнении теории с экспериментом следует учитывать, что в данных расчетах не принималась во внимание гетерогенность силовых постоянных α и ϵ . Учет этого фактора должен привести к уширению ветвей ω_1 , ω_2 , ω_4 и их перекрыванию в спектре, что объясняет сравнительно большую ширину полосы 85 см⁻¹.

Фактор гетерогенности практически не проявляется для наблюдаемого пика при 16 см⁻¹. Здесь сказывается то обстоятельство, что природа этого пика определяется достаточно однородным силовым полем остова при относительно малой величине постоянной качания β . Существенной особенностью пика является его чувствительность к конформационному состоянию ДНК [4—8]. В рамках развитой модели видно, что частота пика фактически отражает напряжение остова и может служить индикатором его состояния. По-видимому, колебания, обуславливающие пик при 16 см⁻¹, являются нижайшими внутримолекулярными колебаниями оптического типа для макромолекулы ДНК.

Развитые представления могут быть использованы для количественного характеризования низкочастотной динамики макромолекулы. В настоящей работе рассчитаны амплитуды нормальных колебаний ДНК в В-форме. Результаты расчетов представлены в табл. 2. Здесь же указаны вычисленные нами амплитуды растяжения водородных связей в парах оснований (δ). Приведенные результаты подтверждают наши качественные выводы о характере колебаний в низкочастотных ветвях ДНК. Как видно из табл. 2, внутринуклеозидные степени свободы существенны при описании колебаний, образующих полосу (ω_1 , ω_2 , ω_4).

Таблица 1

Сравнение экспериментальных значений частот колебаний (см⁻¹) с рассчитанными для В-формы ДНК

Comparison of experimental values of vibration frequencies (cm⁻¹) with those calculated for DNA B-form

Эксперимент	[3]	[4]	[5]	[6]	[7,8]	Наши расчеты
Полоса	85 ± 30	90 ± 25	90	85 ± 30	—	114 85 62
Пик		14	16	16	12	17 16

Примечание. Экспериментальные результаты приведены для Na-соли ДНК тимуса теленка.

В ветвях ω_1 и ω_2 колебания происходят с растяжением водородных связей, что соответствует наблюдаемым эффектам [3, 4]. Колебания ω_3 и ω_5 осуществляются без значительного участия внутринуклеозидной подвижности. Отметим, что движения в ветвях ω_3 и ω_5 имеют наибольшую амплитуду и могут играть важную роль в процессах взаимодействия макромолекулы с другими биополимерами, в частности, в нуклеиново-белковом узнавании. Обладая также возможностью подстраивать частоту к конформационному состоянию макромолекулы, колебания нижайших ветвей могут служить одним из каналов непосредственной передачи воздействия на ДНК.

Таблица 2

Результаты расчета амплитуд нормальных колебаний в низкочастотном диапазоне для макромолекулы ДНК в В-форме (в скобках указана фаза колебания)

Calculation of amplitudes of optical type normal vibrations for DNA-macromolecule in B-form (in brackets the vibration phase is pointed out)

Амплитуда (T=300 К)	ω_1	ω_2	ω_3	ω_4	ω_5
\tilde{X} , нм	(-)0,005	(+)0,020	(-)0,057	0	0
\tilde{Y} , нм	(-)0,002	(-)0,011	(-)0,068	0	0
$\tilde{\theta}$, рад	(+)0,07	(+)0,02	(+)0,24	0	0
$\tilde{\rho}$, нм	(+)0,014	(-)0,019	(+)0,001	0	0
\tilde{x} , нм	0	0	0	(-)0,013	(-)0,036
\tilde{u} , нм	0	0	0	(+)0,007	(-)0,067
$\tilde{\xi}$, рад	0	0	0	0	(+)0,24
$\tilde{\eta}$, нм	0	0	0	(+)0,023	0
$\tilde{\delta}$, нм	0,009	0,007	0	0	0

Таким образом, развитая модель позволяет качественно и количественно описать особенности низкочастотных колебаний и определить природу низкочастотных спектров КР макромолекул ДНК.

THEORETICAL STUDIES IN LOW-FREQUENCY VIBRATIONS OF DNA MACROMOLECULES

S. N. Volkov, A. M. Kosevich, G. E. Wainreb

Institute for Theoretical Physics,
Academy of Sciences of the Ukrainian SSR, Kiev;
Institute for Low Temperature Physics and Engineering,
Academy of Sciences of the Ukrainian SSR, Kharkov;
Temporary Scientific Group «Otklik», Kiev

Summary

The theoretical investigation of low-frequency dynamics of DNA macromolecules is theoretically studied taking into account the hydrogen bond stretching in base pairs, the backbone flexibility and intranucleoside mobility. The structure of low-frequency macromolecule vibration spectrum is determined. Using the theoretical results obtained and their correlation with DNA Raman spectra the interpretation of the set of experimental data is presented.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Малеев В. Я. Крутильные колебания оснований в нуклеиновой кислоте // Биофизика. — 1965. — 10, № 5. — С. 729—734.
2. Painter P. C., Mosher L., Rhoads C. Low-frequency modes in the Raman spectrum of DNA // Biopolymers. — 1981. — 20, N 1. — P. 243—247.
3. Urabe H., Tominaga Y. Low-frequency Raman spectra of DNA // J. Phys. Soc. Japan. — 1981. — 50, N 11. — P. 3543—3544.

4. Urabe H., Tominaga Y. Low-lying collective modes of DNA double helix by Raman spectroscopy // Biopolymers.—1982.—21, N 11.— P. 2477—2481.
5. Urabe H., Tominaga Y., Kubota K. Experimental evidence of collective vibrations in DNA molecule // J. Chem. Phys.—1983.—78, N 10.— P. 5937—5939.
6. Collective vibrational modes in molecular assembly of DNA and its application to biological systems. Low-frequency Raman spectroscopy / H. Urabe, H. Hayashi, Y. Tominaga et al. // J. Chem. Phys.—1984.—82, N 1.— P. 531—535.
7. Lindsay S. M., Powell J. W., Rupprecht A. Observation of low-lying Raman bands in DNA by tandem interferometry // Phys. Rev. Lett.—1984.—53, N 19.— P. 1853—1855.
8. Interhelical effects on the low-frequency modes and phase transitions of Li- and Na-DNA / C. Demarco, S. M. Lindsay, M. Pokorny et al. // Biopolymers.—1985.—24, N 11.— P. 2035—2040.
9. Raman spectroscopic study on low-frequency collective modes in self-associates of guanosine monophosphates / H. Urabe, Y. Sugawara, M. Tsukakoshi et al. // Ibid.—1987.—26, N 6.— P. 963—971.
10. Breathing models and induced resonant melting of the double helix / E. W. Prohofsky, K. C. Lu, L. L. van Zandt, B. F. Putnam // Phys. Lett. A.—1979.—70, N 5, 6.— P. 492—494.
11. Acoustic modes and nonbounded interactions of the double helix / W. N. Mei, M. Kohli, E. W. Prohofsky, L. L. van Zandt // Biopolymers.—1981.—20, N 4.— P. 833—852.
12. Far-infrared spectroscopy on oriented films of dry and hydrated DNA / A. Wittlin, L. Genzel, F. Kremer et al. // Phys. Rev. A.—1986.—34, N 1.— P. 493—500.
13. Chou K. C. Low-frequency collective motion in biomacromolecules and its biological functions // Biophys. Chem.—1988.—30, N 1.— P. 3—48.
14. Волков С. Н., Косевич А. М. Конформационные колебания двуцепочечной ДНК.— Киев, 1986.—25 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теор. физики; № 86-119Р).
15. Волков С. Н., Косевич А. М. О конформационных колебаниях ДНК // Молекуляр. биология.—1987.—21, № 3.— С. 797—806.
16. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот.— М.: Мир, 1987.—584 с.
17. Volkov S. N., Kosevich A. M., Weinreb G. E. Spectrum of low-frequency vibrations of DNA macromolecules.— Kiev, 1988.—19 p.— (Preprint / Acad. Sci. of Ukr. S. S. R., Inst. Theor. Phys; N 88-177E).

Ин-т теор. физики АН УССР, Киев
 Физ.-техн. ин-т низких температур АН УССР, Харьков
 Врем. науч. коллектив «Отклик», Киев

Получено 01.06.89

УДК 517.150.6

Н. Н. Береговская, А. В. Савич

ГОМОЛОГИЧНОСТЬ АМИНОКИСЛОТНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ СУПЕРОКСИД-ДИСМУТАЗ И БЕЛКОВ, КОДИРУЕМЫХ НА МИТОХОНДРИАЛЬНОМ ГЕНОМЕ

Оценена степень гомологичности между аминокислотными последовательностями супероксид-дисмутаз (СОД), субъединиц NADH-дегидрогеназ, кодируемых на митохондриальном геноме (НД), и бактериальной NADH-дегидрогеназы. При сопоставлении в противоположных направлениях карбоксильные участки NADH-дегидрогеназ наиболее гомологичны митохондриальной Мп-СОД. Некоторые выводы подкрепляются сопоставлением нуклеотидных последовательностей.

СОД различаются металлом, входящим в их активные центры [1]. Бактериальные СОД состоят из двух одинаковых субъединиц, имеющих около 200 аминокислотных остатков, между которыми расположен атом металла — Fe либо Cu. У эукариот имеется митохондриальная Мп-СОД, состоящая из четырех субъединиц, и цитоплазматическая Cu/Zn-СОД, содержащая одну белковую цепь из примерно 150 остатков, с присоединенными к ней атомами Cu и Zn. Cu/Zn-СОД обнаружена и у *Photobacterium leignathi* [2]. Предполагают, что она приобретена от хозяйки — паразитирующей бактерии — сребробрюшковой рыбы.