

Почему ДНК конденсируется в присутствии ионов натрия легче, чем в присутствии ионов калия*Е.С. Колесников¹, И.Ю. Гуцин¹, П.А. Жилев², А.В. Онуфриев³*¹Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)²Center for Design, Manufacturing and Materials, Skolkovo Institute of Science and Technology³Политехнический университет Виргинии (США)

Внутри ядра клетки содержание ионов калия сильно превышает количество ионов натрия, в то время как в межклеточном пространстве натрий наоборот преобладает. ДНК хранит генетическую информацию и позволяет клеткам размножаться и синтезировать необходимые биополимеры. Сама ДНК хранится внутри ядра клеток в компактном виде, а значит взаимодействует в основном с ионами калия. Сегодня экспериментальные буферы чаще всего содержат натриевые соединения, что не отражает нативных внутриклеточных условий. Возникает вопрос: насколько корректно использование солей натрия вместо калия для имитации внутриклеточной среды? В 2005 году были опубликованы результаты экспериментального исследования конденсации ДНК в растворах с различными одновалентными ионами с добавлением полиэтиленгликоля [1], который моделирует содержащиеся в ядре полимеры. Оказалось, что в растворе хлорида натрия ДНК конденсируется при меньшей концентрации соли, чем в растворе хлорида калия. Это говорит о зависимости некоторых процессов от типа одновалентного катиона, взаимодействующего с ДНК.

В работе проведены исследования зависимости процесса конденсации ДНК от типа одновалентного иона в условиях, имитирующих внутриклеточные. Сравнения проведены между системами с хлоридами натрия и калия. При помощи метода молекулярной динамики получены распределения ионов вокруг двух нитей ДНК. Чтобы установить связь между распределением ионов и склонностью иона конденсировать ДНК, мы используем модель оболочек. В рамках этой теории пространство вокруг оси спиральной молекулы делится на несколько областей. Слой внутреннего радиуса 7Å , и внешнего 12Å , ось которого совпадает с осью полимера, называется внутренней оболочкой, слой от 12 до 16Å – внешней. Теория утверждает, что чем больше ионов находится во внешней оболочке ДНК, тем легче она конденсируется.

Проведенные исследования показали, что во внешних оболочках нитей ДНК в системах с натриевой солью скапливается больше ионов, чем с калиевой в большом диапазоне концентраций солей. Конечная разница энергий между системами с разными ионами согласно теории ионных оболочек составила около 1 кТ вне зависимости от концентрации соли. Это значит, что вероятность конденсации в натриевом растворе выше в 2,5-3 раза. Также среднее по времени расстояние между нитями ДНК в растворах с ионами натрия было меньше, чем с ионами калия при одинаковой концентрации. Это позволяет объяснить результаты эксперимента с позиций теории ионных оболочек – увеличение количества ионов в пересечении внешних оболочек двух участков ДНК сопровождалось снижением энергии системы и сближением дуплексов.

Работа выполнена при поддержке Государственного задания РФ (соглашение №075-00337-20-03, проект FSMG -2020-0003)

Литература

1. Zinchenko A., Yoshikawa K. (2005). Na^+ Shows a Markedly Higher Potential than K^+ in DNA Compaction in a Crowded Environment. *Biophysical Journal*, 88, 4118–4123. <https://doi.org/10.1529/biophysj.104.057323>
2. Tolokh I.S., Drozdetski A.V., Pollack L., Baker N.A., Onufriev A.V. (2016). Multi-shell model of ion-induced nucleic acid condensation. *The Journal of Chemical Physics*, 144(15), 155101. <https://doi.org/10.1063/1.4945382>