

## ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕНАТУРАЦИИ ДНК НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ ПЕЙРАРДА-БИШОПА-ДОКСУА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Рубанов А.В., Ханыгин Е.А., Лихачев И.В.

Тульский Государственный Университет ИМПБ РАН – филиал им. М.В. Келдыша РАН

Данная работа посвящена исследованию модели Пейрарда-Бишопа-Доксуа (ПБД) [1] – одномерную модель ДНК где каждая пара основания представлена материальной точкой. Исследование проводилось методом моделирования молекулярной динамики. Задачей моделирования является получение термодинамических характеристик вблизи точки фазового перехода.

Причиной плавления ДНК является увеличение температурных флуктуаций. При этом обе цепочки ДНК отходят друг от друга, разрывая водородные связи. Сами цепочки остаются неразрывными.

Модель ПБД позволяет моделировать поведение разрывающихся водородных связей, используя потенциал Морзе, и неразрывность каждой из цепочек, описанных межсайтовым потенциалом.

Для поиска температуры плавления проводится два способа расчетов:

Метод канонического ансамбля. Параллельно запускается набор вычислительных экспериментов (порядка 256 для статистической значимости), каждый со своей постоянной температурой.

Метод линейного нагревания. Изначально берется система при температуре, заведомо ниже температуры плавления (0-200 К). В ходе моделирования температура нагревается. В каждом из экспериментов молекула плавится при разной температуре вблизи точки плавления. Опыт повторяется также порядка 256-512 раз для более точного поиска и описания процесса плавления.

Для поддержания температуры в каждом из методов используется столкновительный термостат [2-3].

В работе показана методика поиска точки плавления. Также показано, что характер плавления ДНК носит вероятностный характер [1].

1. Peyrard M., Bishop A.R. Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation // *Phys. Rev. Lett. American Physical Society*, 1989. Vol. 62, № 23. P. 2755–2758.

2. Lemak A.S., Balabaev N.K. A Comparison Between Collisional Dynamics and Brownian Dynamics // *Molecular Simulation. Taylor & Francis*, 1995. Vol. 15, № 4. P. 223–231.

3. Lemak A.S., Balabaev N.K. Molecular dynamics simulation of a polymer chain in solution by collisional dynamics method // *Journal of Computational Chemistry*. 1996. Vol. 17, № 15. P. 1685–1695.

4. Likhachev I.V., Lakhno V.D. The direct investigation of DNA denaturation in Peyrard-Bishop-Dauxois model by molecular dynamics method // *Chemical Physics Letters*. 2019. Vol. 727. P. 55–58.