

# ИЗОТОПНЫЙ $^2\text{H}/^1\text{H}$ СОСТАВ ВОДНОГО ОКРУЖЕНИЯ МОЖЕТ ИЗМЕНЯТЬ ВЕРОЯТНОСТЬ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ЗОН ОТКРЫТЫХ СОСТОЯНИЙ В МОЛЕКУЛЕ ДНК

Н. С. Рукояткин, К. Р. Беспалко, О. В. Решетникова, В. А. Бражко, С. С. Джима

*Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия*

В физиологическом диапазоне температур самопроизвольное возникновение открытых состояний (разрывов водородных связей между парами азотистых оснований), а также пузырей (областей с несколькими открытыми состояниями (ОС) подряд) происходит редко. В основном эти процессы инициируют специализированные ферменты в момент, когда генетический код доступен для молекулярных механизмов считывания информации. Возникновение зон ОС происходит во время транскрипции, репликации, рекомбинации, восстановления или связывания любого фермента на отдельных цепях.

Известно, что изменение содержания дейтерия в живых системах оказывает влияние на метаболические процессы в них [1]. Причем, это касается как повышенных [2], так и пониженных концентраций дейтерия относительно природного уровня [1].

С учетом вышесказанного, попадание атома дейтерия в водородные связи между парами азотистых оснований ДНК может оказывать влияние на термодинамические характеристики как в месте его локализации, так и на отдаленных участках [3]. Произвести оценку этих изменений можно только с использованием методов математического моделирования.

С помощью угловой математической модели ДНК [3] установлено, что вероятность образования пузырей определенной длины (от 12 до 27 нуклеотидов) зависит от локализации атома дейтерия в молекуле ДНК и может существенно отличаться от вероятности возникновения открытых состояний в целом. При этом необходимо отметить, что, хотя в большинстве случаев различия в возникновении открытых состояний в бездейтериевой ДНК в сравнении с той же молекулой, включающей единичную  $^2\text{H}/^1\text{H}$  замену, составляет при воздействии  $E_{\text{кр}}$  (в диапазоне от 270 до  $290 \cdot 10^{-25}$  Н·м) достаточно невысокую величину: максимальное возрастание количества открытых состояний было около 2.8% (при замене изотопов водорода в 20-й паре азотистых оснований), наибольшее уменьшение количества открытых состояний наблюдалось менее чем на 2.9% (при замене изотопов водорода в 353-й паре азотистых оснований); изменение частоты возникновения пузырей ДНК различной длины в свою очередь составило уже существенно более значимую величину: снижение на 36.3% и возрастание на 250.4% при замене изотопов водорода в 353-й и 376-й парах азотистых оснований соответственно (при  $E_{\text{кр}}$  равном  $290 \cdot 10^{-25}$  Н·м).

## Библиографические ссылки

1. Possible mechanisms of biological effects observed in living systems during  $^2\text{H}/^1\text{H}$  isotope fractionation and deuterium interactions with other biogenic isotopes / A. Basov [et al.] // Molecules. 2019. Vol. 24, iss. 22. P. 4101.

2. Смещение прооксидантно-антиоксидантного равновесия в организме лабораторных животных при пятикратном повышении концентрации дейтерия в питьевом рационе / С. В. Козин [и др.] // Биофизика. 2023. Т. 68, № 2. С. 369–375.

3. Inequality in the frequency of the open states occurrence depends on single  $^2\text{H}/^1\text{H}$  replacement in DNA / A. Basov [et al.] // Molecules. 2020. Vol. 25, iss. 16. P. 3753.