

Моделирование электрических сил, управляющих движением геликазы в системе с двойной спиралью ДНК, с учётом базы данных для белков

И. В. Семченко¹, И. С. Михалко², П. В. Сомов², А. Л. Самофалов²

¹Государственное НПО «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника»,

г. Минск, Республика Беларусь,

²Гомельский государственный университет имени Ф. Скорины,

г. Гомель, Республика Беларусь,

semchenko@oelt.basnet.by, samofalov@gsu.by

***Аннотация.** В работе исследуются электрические силы, управляющие движением геликазы в процессе репликации ДНК. Геликаза, ключевой фермент, разделяющий нити двойной спирали, моделируется как электрический диполь с параметрами, полученными из анализа белковых структур. Методом численного моделирования рассчитаны силы взаимодействия между диполем геликазы и нитями ДНК, рассматриваемыми как идеальные проводники. Результаты демонстрируют наличие силы, направленной к вершине вилки, что подтверждает значимость электромагнитных эффектов в механизме репликации. Работа подчёркивает необходимость учёта электрических взаимодействий в исследованиях молекулярной динамики ДНК и открывает перспективы для более детального моделирования с учётом реальных проводящих свойств биомолекул.*

I. Введение

Исследования различных аспектов процесса репликации ДНК, в том числе механических, являются очень актуальными. Например, опубликована статья учёных Корнельского университета (США), в которой рассматриваются механические и топологические свойства хроматина, позволяющие разделять нити ДНК без их запутывания [1]. Исследуется возможное расположение сверхспирализации относительно движущейся реплисомы, при котором происходит мягкое разделение нитей и репликация ДНК без повреждения генов.

Однако особенности электромагнитных сил, действующих в процессе репликации ДНК, остаются за пределами статьи [1], как и многих других статей, в которых рассматриваются преимущественно биохимические свойства ДНК. В то же время, на молекулярном уровне, в нанометровом масштабе макромолекулы ДНК электромагнитные силы имеют неоспоримый приоритет перед другими известными взаимодействиями, существующими в природе. В статьях [2,3] исследованы силы, возникающие в нитях двойной ДНК-подобной спирали под действием световой волны при условии полуволнового резонанса.

В данной работе рассматриваются электрические свойства белка геликазы (helicase), который является важным ферментом при репликации молекулы ДНК. Выполняется моделирование электрических сил, управляющих движением геликазы в системе с двойной спиралью ДНК, с учётом базы данных для белков.

II. Формулы и рисунки

На первом этапе путём теоретического анализа необходимо определить эффективные параметры взаимодействия геликазы с молекулой ДНК при раскручивании двойной спирали. Такой анализ можно провести, с одной стороны, на основе известных характеристик молекулы ДНК [4,5], и с другой стороны, с использованием базы данных для белков, в том числе их электрических характеристик [6]. На первом этапе исследований в качестве электрического дипольного момента геликазы можно использовать среднее значение для белков $P_{hc} = 639Д = 2,13 \cdot 10^{-27}$ Кл · м [6], где $Д$ означает единицу измерения дебай, индекс hc означает принадлежность к геликазе. В общем

случае, электрические заряды могут быть распределены в объёме геликазы сложным образом. Используя в качестве первого приближения простейшую модель – электрический диполь, можно найти расстояние l_{hc} между точечными зарядами диполя $\pm q_{hc}$ (плечо диполя) $l_{hc} = P_{hc}/q_{hc}$. Согласно базе данных [6], среднее значение радиуса белков равно $R_{pr} = 40$ нм, где индекс pr означает принадлежность к белкам - proteins. Принимая, в качестве оценки, плечо диполя геликазы равным среднему диаметру белков, получаем значения заряда диполя, меньшие элементарного заряда. Такой результат не имеет физического смысла, поскольку электрические заряды диполя должны быть кратными элементарному заряду. Следовательно, расстояние между зарядами диполя геликазы должно быть меньше среднего диаметра белков, то есть должно выполняться неравенство $l_{hc} < 2R_{pr}$. Как будет показано ниже, плечо диполя геликазы должно быть сравнимо с характерными размерами двойной спирали ДНК, поскольку геликаза находится вблизи вершины репликационной вилки и её дипольный момент оказывает эффективное воздействие в процессе разделения двойной спирали.

По предварительным оценкам, $q_{hc} = (2 \div 3) \cdot e$, где e – элементарный заряд. Для дальнейших вычислений принимаем электрические заряды диполя геликазы равными двойному элементарному, то есть $q_{hc} = 2e = 3,2 \cdot 10^{-19}$ Кл. Тогда расстояние между зарядами в электрическом диполе геликазы принимает значение $l_{hc} = 6,6$ нм. Такое плечо дипольного момент имеет один порядок величины с радиусом двойной спирали $r = 1$ нм, шагом $h = 3,4$ нм и длиной витка $P = 7,14$ нм [4,5], что свидетельствует о соответствии характерных параметров геликазы и двойной спирали, взаимодействующих между собой.

Рассматривая геликазу с приведенными выше параметрами вблизи вершины репликационной вилки, можно вычислить предельно близкое расстояние между центром диполя геликазы и вершиной вилки:

$$|x| \geq \left(l_{hc} + \frac{r}{\cos\beta} \right) \cdot \frac{1}{\operatorname{tg}\beta} \quad (1)$$

где x – координата центра диполя, ось ОХ совпадает с осью двойной спирали, начало координат находится в вершине вилки, поэтому x принимает отрицательные значения, 2β – угол между спиральными нитями при вершине вилки. Данная формула остаётся корректной даже в предельном случае $l_{hc} \rightarrow 0$, что соответствует большим значениям зарядов диполя геликазы, тогда $|x| \geq r/\sin\beta$, то есть диполь не может приблизиться непосредственно к вершине вилки, поскольку разделённые нити ДНК имеют спиральную структуру. Используя $l_{hc} = 6,6$ нм, значение угла $\beta = 45^\circ$ и указанные выше параметры двойной спирали ДНК, по формуле (1) получаем расстояние между геликазой и вершиной вилки $|x| \geq 4,7$ нм. Такое расстояние соответствует характерным параметрам геликазы и двойной спирали и подтверждает их эффективное взаимодействие.

На втором этапе работы проведено численное моделирование сил электрического взаимодействия геликазы с ДНК-подобной двойной спиралью.

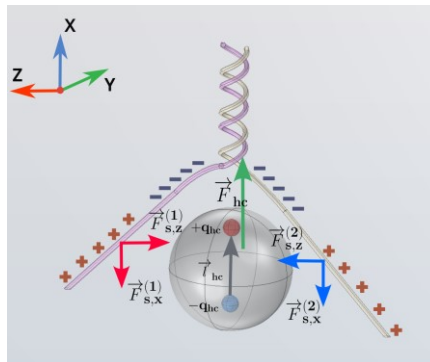


Рис. 1. Модель геликазы вблизи вершины репликационной вилки. Дипольный момент геликазы направлен вдоль оси двойной спирали (вертикально). Индекс s означает принадлежность к нити – strand

Расстояние от вершины репликационной вилки до центра геликазы $|x| = 4,8$ нм, что соответствует формуле (1). Взаимное смещение спиральных нитей вдоль оси X равно $x_s = 0,5$ нм [5]. В первом приближении спиральные нити рассматривались как идеальные проводники.

Расчёты показывают, что электрический диполь геликазы индуцирует на спиральных нитях электрические заряды (они показаны на рис. 1 знаками «плюс» и «минус» вблизи нитей ниже вершины репликационной вилки). В результате взаимодействия зарядов дипольного момента геликазы $\pm q_{hc}$ и индуцированных зарядов возникает сила \vec{F}_{hc} , движущая геликазу к вершине репликационной вилки. Получены значения компонент сил, действующих на геликазу, первую и вторую спиральные нити, эти значения приведены в таблице 1.

Таблица 1. Компоненты сил, действующих на геликазу, первую и вторую спиральные нити

Компоненты сил	Компоненты силы, действующей на геликазу	Компоненты силы, действующей на первую спиральную нить	Компоненты силы, действующей на вторую спиральную нить
X-компонента, 10^{-11} Н	8,275	-2,2264	-5,8255
Y-компонента, 10^{-11} Н	2,6453	0,621	-3,2124
Z-компонента, 10^{-11} Н	-2,6049	-1,0629	3,6706

Проверка соответствия сил третьему закону Ньютона $F_{s,x}^{(1)} + F_{s,x}^{(2)} = -F_{hc,x}$, $F_{s,y}^{(1)} + F_{s,y}^{(2)} = -F_{hc,y}$, $F_{s,z}^{(1)} + F_{s,z}^{(2)} = -F_{hc,z}$ показывает, что погрешность вычислений составляет $(0,1 \div 2,7)\%$, что подтверждает точность расчётов. Для геликазы преобладающее значение имеет x-компонента силы $F_{hc,x}$, направленная к вершине репликационной вилки, которая более чем в 3 раза превышает значения y- и z-компонент сил $F_{hc,y}$ и $F_{hc,z}$.

III. Заключение

Проведенное моделирование подтверждает наличие электрической силы \vec{F}_{hc} , движущей геликазу к вершине репликационной вилки. Полученный результат может быть использован при более детальном описании репликации молекулы ДНК с учётом электромагнитных взаимодействий на молекулярном уровне, в нанометровом масштабе макромолекулы ДНК.

Работа выполнена в рамках ГПНИ КОНВЕРГЕНЦИЯ-2025, подпрограмма «Междисциплинарные исследования и новые зарождающиеся технологии».

Литература

- [1] T. T. Le, X. Gao, S. ha Park, J. Lee, J.T. Inman, J. H. Lee, J. L. Killian, R. P. Badman, J. M. Berger, M. D. Wang, “Synergistic Coordination of Chromatin Torsional Mechanics and Topoisomerase Activity”, *Cell* 179, 2019, pp. 619-631.
- [2] I. V. Semchenko, I. S. Mikhalka, I. A. Faniayeu, S. A. Khakhomov, A. P. Balmakou, S. A. Tretyakov, “Optical Forces Acting on a Double DNA-Like Helix, Its Unwinding and Strands Rupture”, *Photonics*, 2020, 7, 83.
- [3] I. V. Semchenko, I. S. Mikhalka, A. L. Samofalov, S. A. Khakhomov, “Controlling the Shape of a Double DNA-like Helix as an Element of Metamaterials”, *Photonics* 2024, 11, 788.
- [4] J. D. Watson, F.H.C. Crick, “A Structure for Deoxyribose Nucleic Acid”, *Nature*, 1953, 171, pp. 737-738.
- [5] J. D. Watson, T. A. Baker, S. P. Bell, A. Gann, M. Levine, R. Losick, “Molecular Biology of the Gene”, 7th ed., Pearson: London, UK, 2013, 912 p.
- [6] C. E. Felder, J. Prilusky, J. L. Sussman, “A server and database for dipole moments of proteins”, *Nucleic Acids Research*, 2007, P. 512-521.