

Курси підвищення кваліфікації для вчителів математики та фізики
Київ, 20 вересня 2025



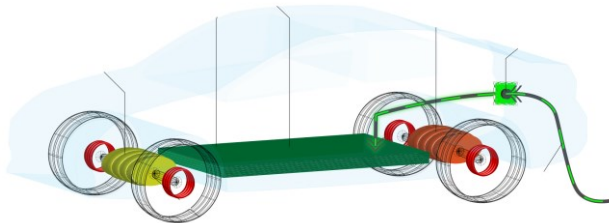
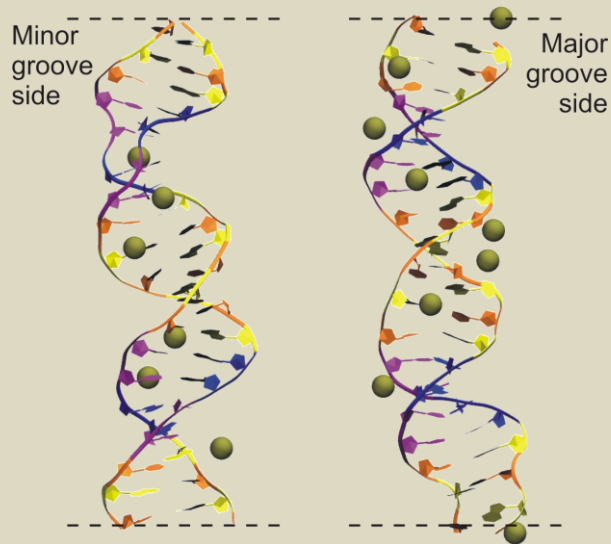
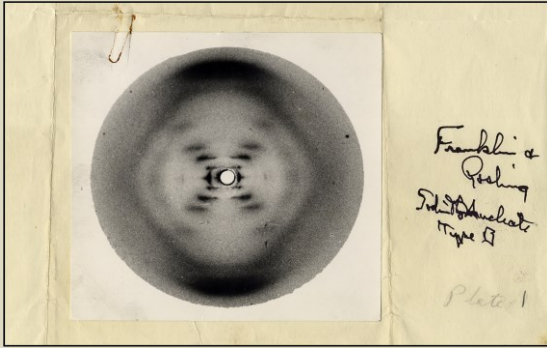
Біофізика ДНК: від фундаментальних до технологічних задач

Сергій Перепелиця

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова
Національної академії наук України



20.09.2025



План

- Історичний огляд проблеми взаємодії протийонів з ДНК
- Особливості структури та динаміки подвійної спіралі ДНК
- Взаємодія протийонів з подвійною спіраллю ДНК
- ДНК в технологічних застосуваннях

структури ДНК (25 квітня 1953р.)

Р. Франклін, Р. Гослінг

April 25, 1953 Vol. 17

In the present case the fibre-axis angle is 34° and the very strong reflexion at 3-4 Å lies on tenth layer line. Moreover, lines of maxima radiate from the 3-4 Å reflexion as lines from the origin visible on the fifth and lower layer lines, having λ minimum coincident with that of the origin so that they are all reflections from the same surface, which apparently is twisted for some reason, although it is not, however, so easily explained. This suggests strongly that there are exactly 10 residues per turn of the helix. If this is so, then from a measurement of R_0 the position of the first maximum on the $n=1$ layer line (for $n \leq 6$), the radius of the helix can be obtained. In the present instance, measurements of R_0 , R_1 and R_2 all lead to values of r of about 10 Å.

Franklin R.E., Gosling R.G. Molecular configuration in sodium thymonucleate. *Nature*. 171, 740-741 (1953).

Таємниця структури гену (1940-1950 pp.)



Oswald Avery
(1877-1955)

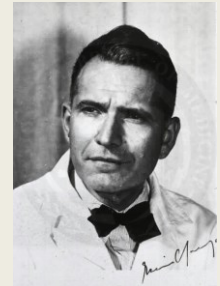
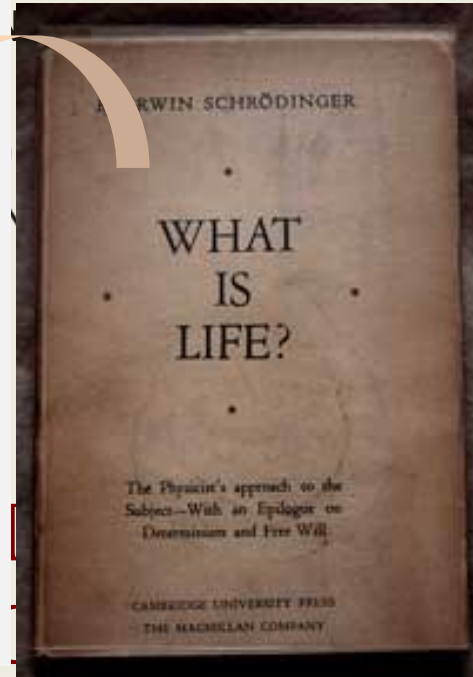


Colin MacLeod
(1909-1972)

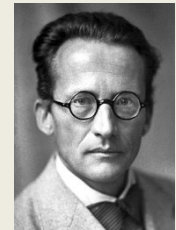


Maclyn McCarty
(1911-2005)

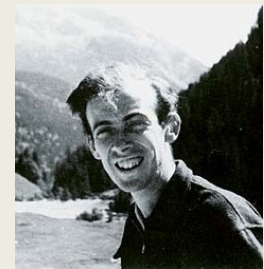
*Gene is an
aperiodic
crystal*



Erwin Chargaff
(1905-2002)



Erwin Schrödinger
(1887-1961)

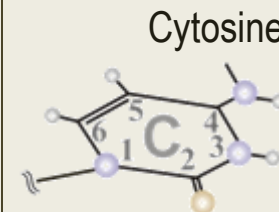
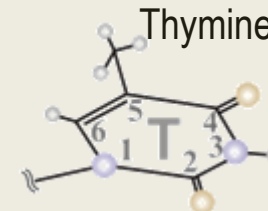


James Watson
(1928)

Chargaff Complementarity Rule

DNA source	Adenine	Thymine	Guanine	Cytosine
Calf Thymus	1.7	1.6	1.2	1.0
Beef Spleen	1.6	1.5	1.3	1.0
Yeast	1.8	1.9	1.0	1.0
Tubercle Bacillus	1.1	1.0	2.6	2.4

(From Vischer, Zamenhof and Chargaff, 1949, p. 433, and Chargaff *et al.*, 1949, p. 413).



Дослідження в Кавендішській лабораторії Кембриджського університету



Лоуренс Брегг
(1880-1971)



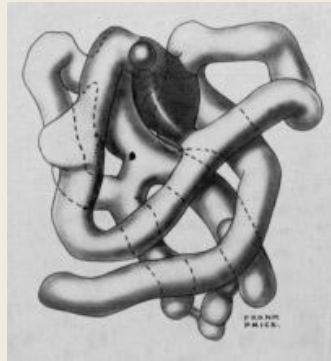
Макс Перуц
(1914-2002)



Джон Кендрю
(1917-1997)

Рентгенівські дослідження

Молекула міоглобіну (1959)



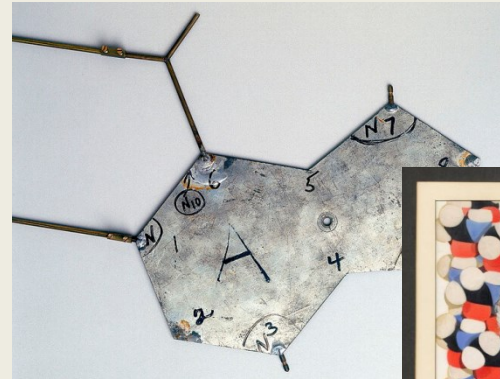
Молекула гемоглобіну



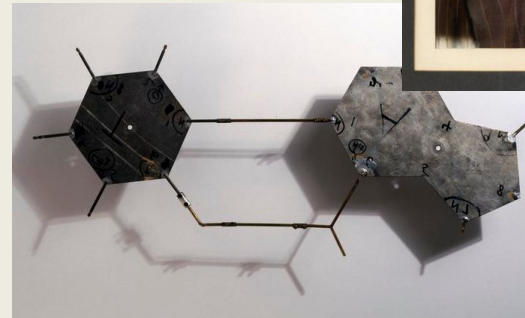
<https://www2.mrlmb.cam.ac.uk/achievements/lmb-nobel-prizes/1962-john-kendrew-max-perutz/>

Моделювання структури ДНК

Зразок аденіну



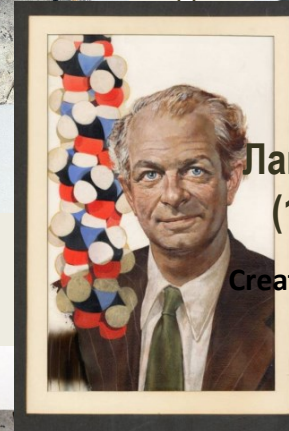
Пара А-Т



© The Board of Trustees of the Science Museum

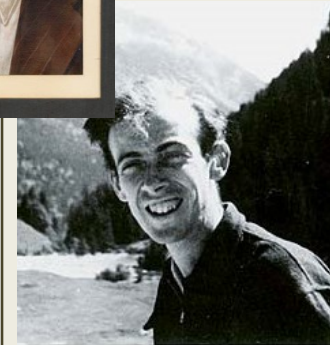


Френсіс Крік
(1916-2004)



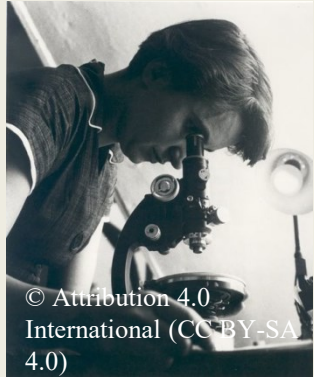
Лінус Полінг
(1901-1994)

Creator: Leon Tadrick



Джеймс Уотсон
(1928)

Дослідження у відділі біофізики Королівського коледжу



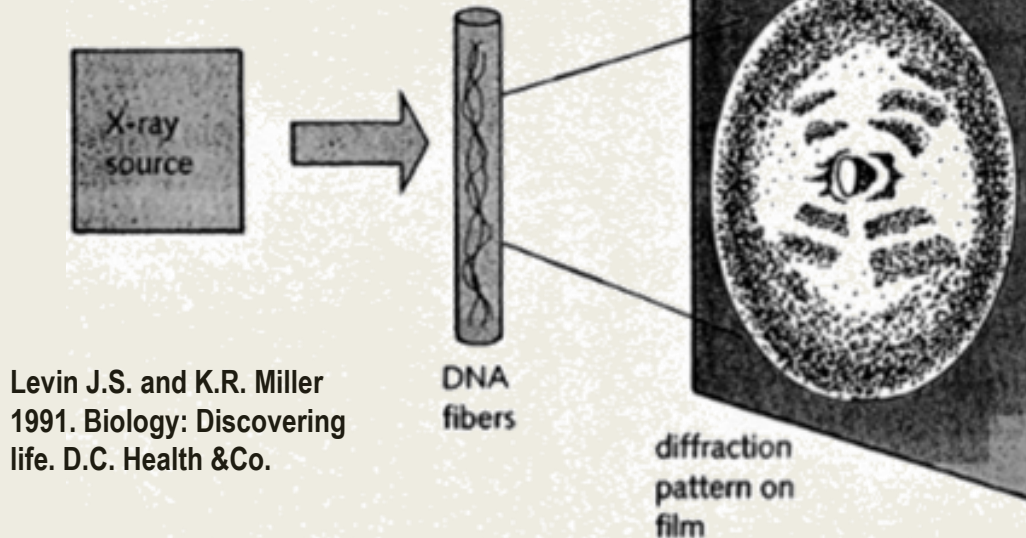
© Attribution 4.0
International (CC BY-SA
4.0)

**Розалінд Франклін
(1920-1958)**



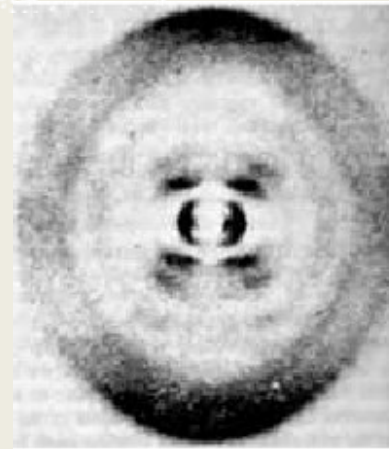
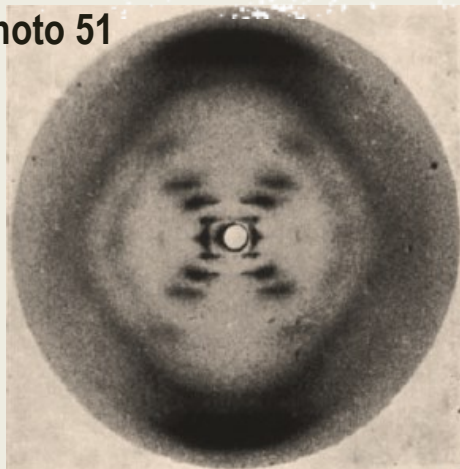
**Реймонд Гослінг
(1926-2015)**

Рентгеноструктурні дослідження ДНК

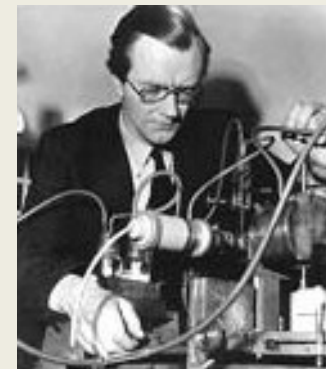


Levin J.S. and K.R. Miller
1991. Biology: Discovering
life. D.C. Health &Co.

Photo 51



**Джон Рендал
(1869-1940)**



**Морріс Уілкінс
1905-2002**

Перші моделі структури молекули ДНК

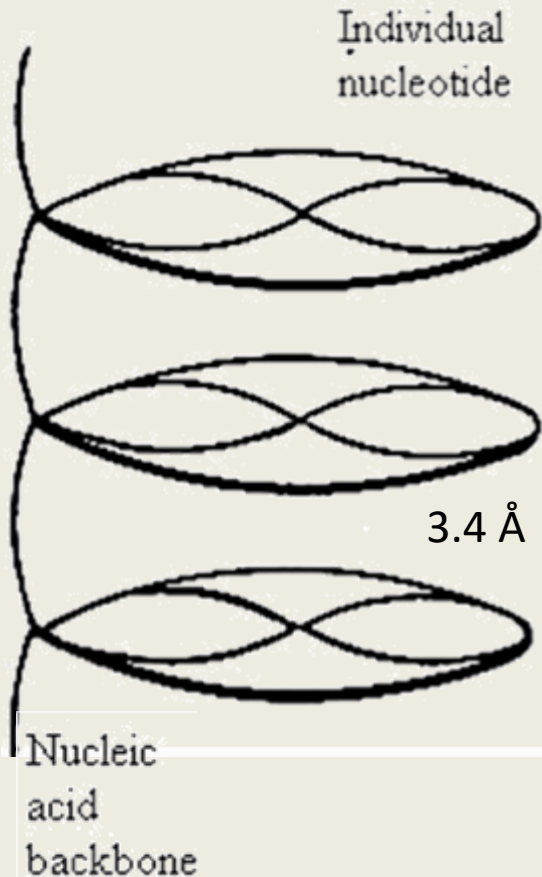


Вільям Азтбурі
(1898-1961)



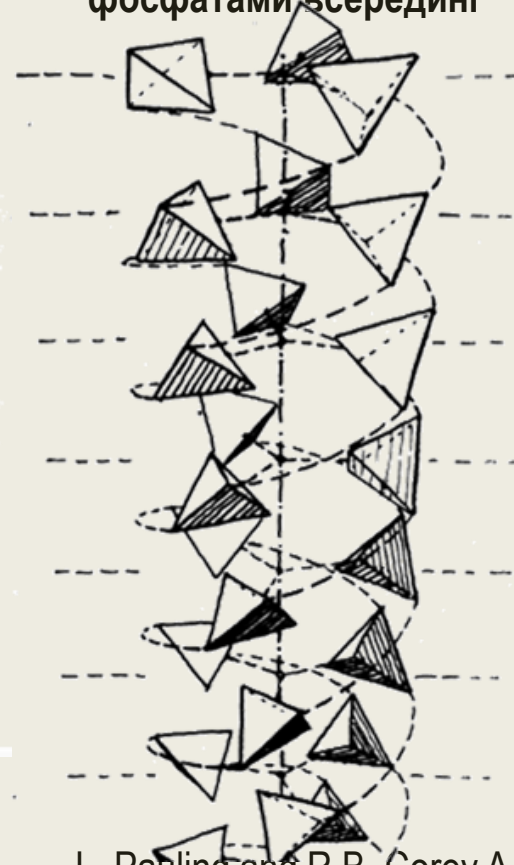
Флоренс Белл
(1913-2000)

Модель “стопка пенні”

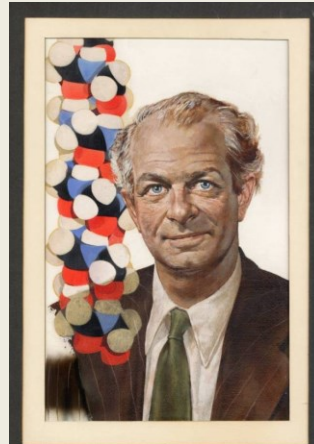


Astbury, W., Bell, F. X-Ray Study of Thymonucleic Acid. *Nature* **141**, 747–748 (1938).

Модель потрійної спіралі з фосфатами всередині

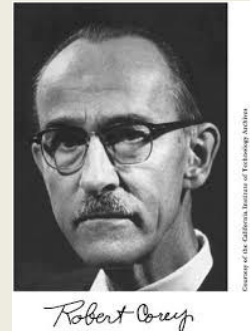


L. Pauling and R.B. Corey A proposed structure for the nucleic acids. *Proc. N. A. S.* **39**, 84-97 (1953)



Лайнус Полінг
(1901-1994)

Creator: Leon Tadrick

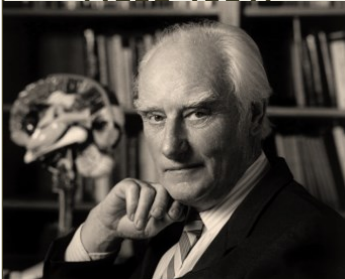


Роберт Корей
(1897-1971)

Біологічне функціонування ДНК



Георґі (ґорґі) Ґамов
(1898-1961)

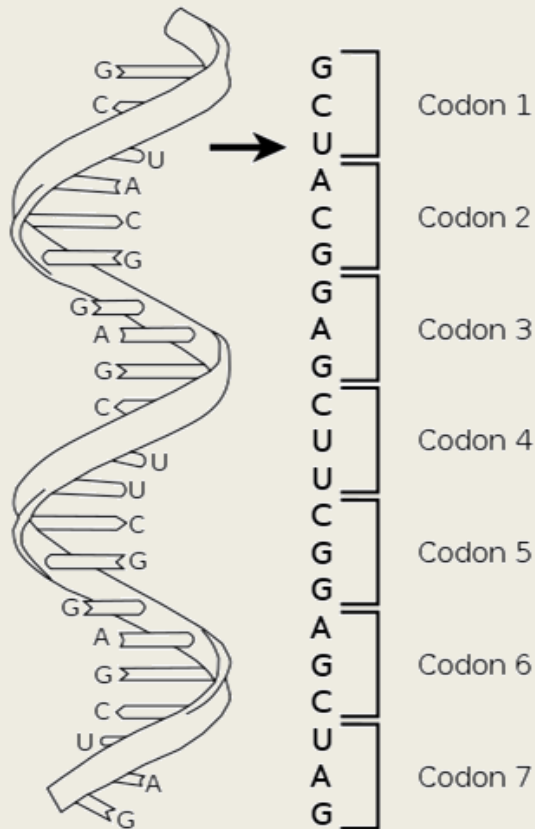


Френсіс Крік
(1916 – 2004)



Микола Тарнавський
(1906-1953)

Кодування генетичної інформації

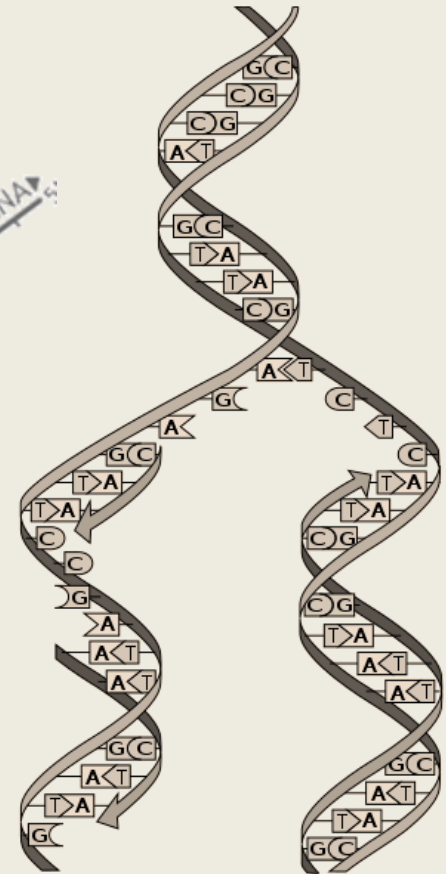


RNA

Транскрипція ДНК



Редублікація ДНК

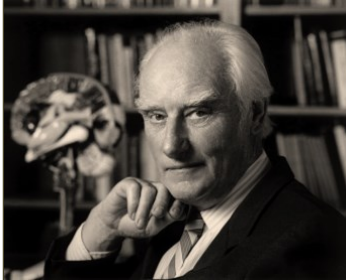


© Creative Commons CC0 1.0 Universal
Public Domain Dedication
https://commons.wikimedia.org/wiki/File:DNA_replication_split.svg

Структура макромолекули ДНК

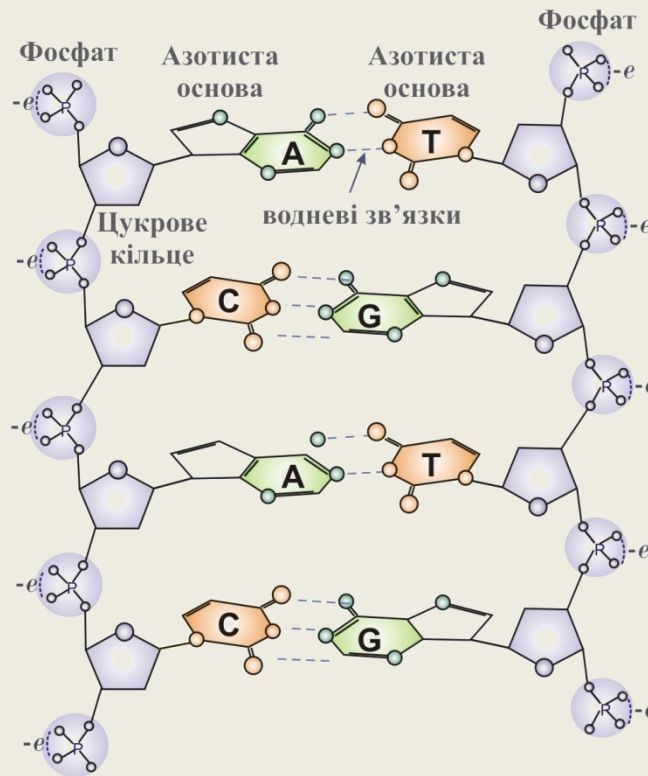


James Watson
(1928)

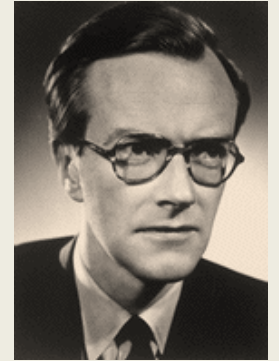
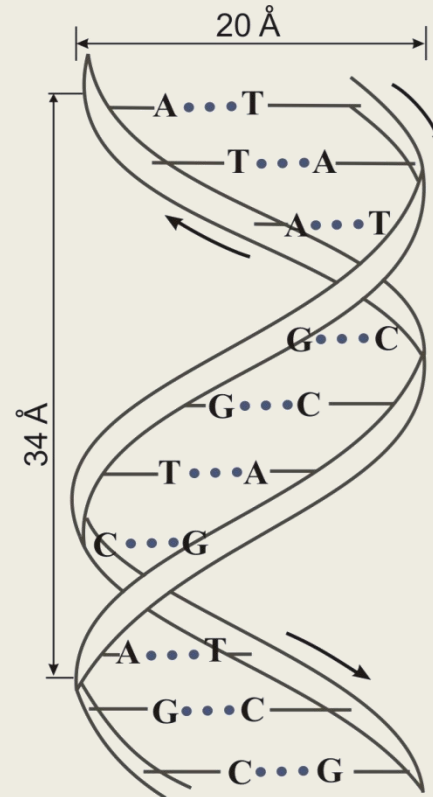


Francis Crick
(1916 – 2004)

Структурні елементи ДНК



Подвійна спіраль ДНК



Maurice Wilkins
(1916-2004)



Rosalind Franklin
(1920 – 1958)

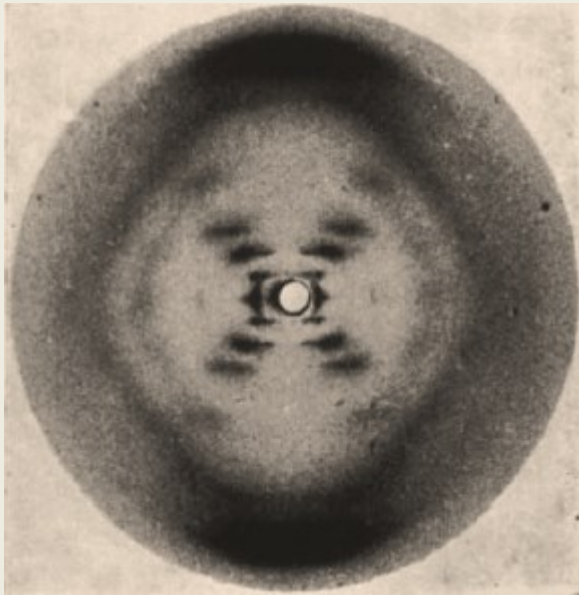
Watson J.D., Crick F.H.C. A structure of deoxyribose nucleic acid. *Nature*. 171, 737-738 (1953).

Wilkins M.H.F., Stokes A.R., Wilson H.R. Molecular structure of deoxypentose nucleic acid. *Nature*. 171, 738-740 (1953).

Franklin R.E., Gosling R.G. Molecular configuration in sodium thymonucleate. *Nature*. 171, 740-741 (1953).

Розалінда Франклін і відкриття структури ДНК

Molecular Configuration in Sodium Thymonucleate



Sodium deoxyrybose nucleotide
from calf thymus.

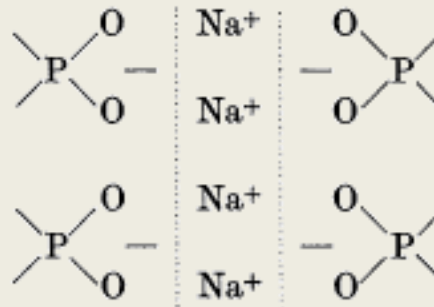
Structure B

Franklin R.E., Gosling R.G. Molecular configuration in sodium thymonucleate. *Nature*. 171, 740-741 (1953).

Franklin R.E., Gosling R.G. Evidence for 2-chain helix in crystalline structure of sodium deoxyribonucleate. *Nature*. 172, 156—157 (1953).

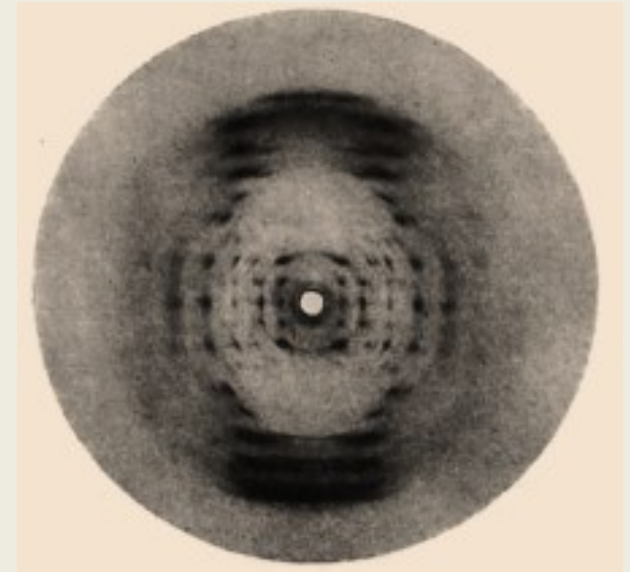


Rosalind Franklin
1920 - 1958



The Structure of Sodium Thymonucleate Fibres. I. The Influence of Water Content

BY ROSALIND E. FRANKLIN* AND R. G. GOSLING



Sodium deoxyrybose nucleotide
from calf thymus.

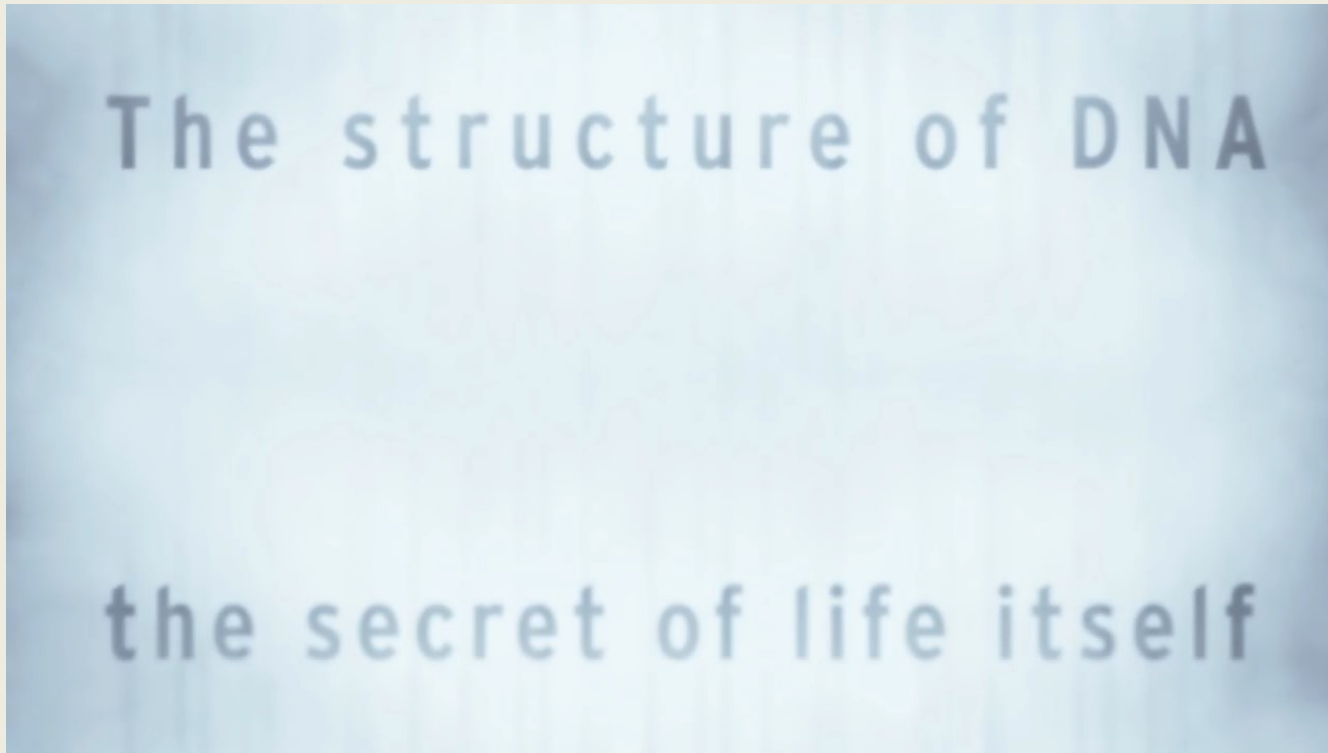
Structure A

*"...we should expect a tendency
for the phosphate groups to
associate with one another ..."*

Franklin R.E., Gosling R.G.

The structure of sodium thymonucleate fibers. I. and II.
Acta. Cryst. 6, 673-677 (1953); *Acta. Cryst.* 6, 678-685 (1953);

Розалінда Франклін і відкриття структури ДНК



Rosalind Franklin
1920 - 1958

<https://www.youtube.com/watch?v=b3uoyjfyQWQ>

Розалінда Франклін і відкриття структури ДНК

Joshua Silver and Nicole Kidman

© *Johan Persson*



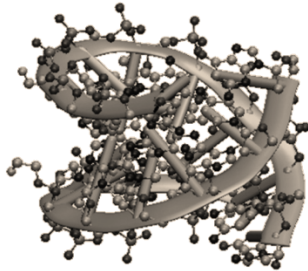
Performance: Photograph 51 (London, 2015)



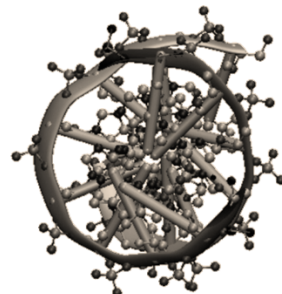
Rosalind Franklin
1920 - 1958

Різні форми подвійної спіралі ДНК

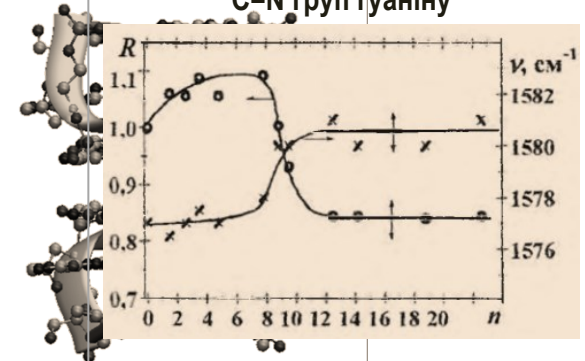
A-форма ДНК



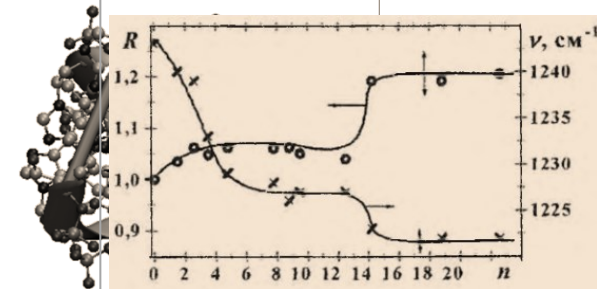
B-форма ДНК



Спектральні прояви
B – A переходу
Z-форма ДНК
Внутрішньокільцеве коливання
C=N груп гуаніну



Антисиметричні коливання PO₂-
групи ДНК

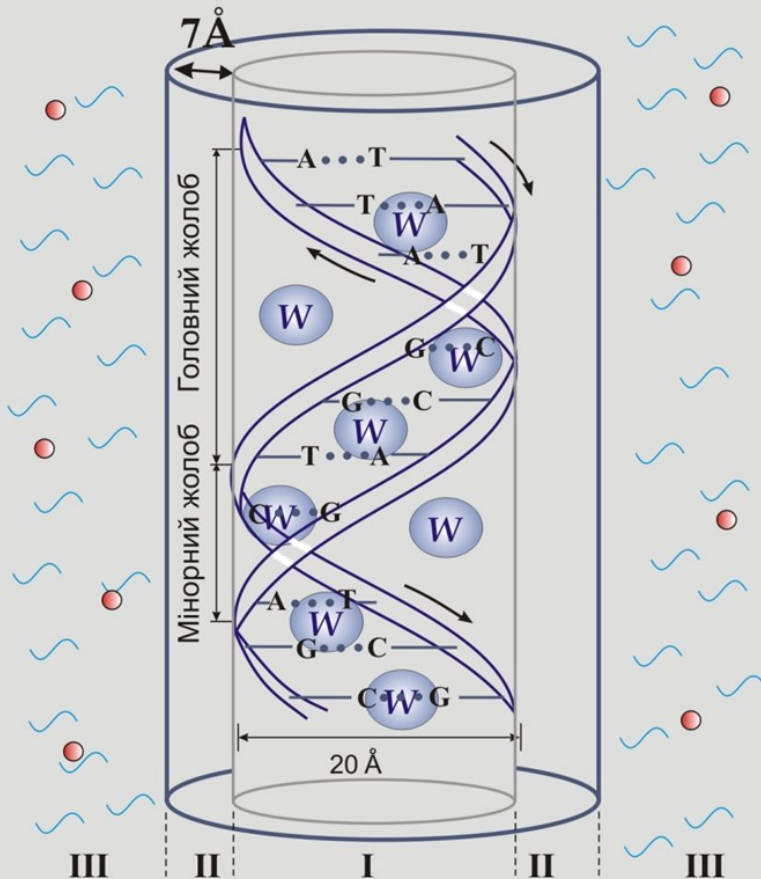


Харківська біофізична школа

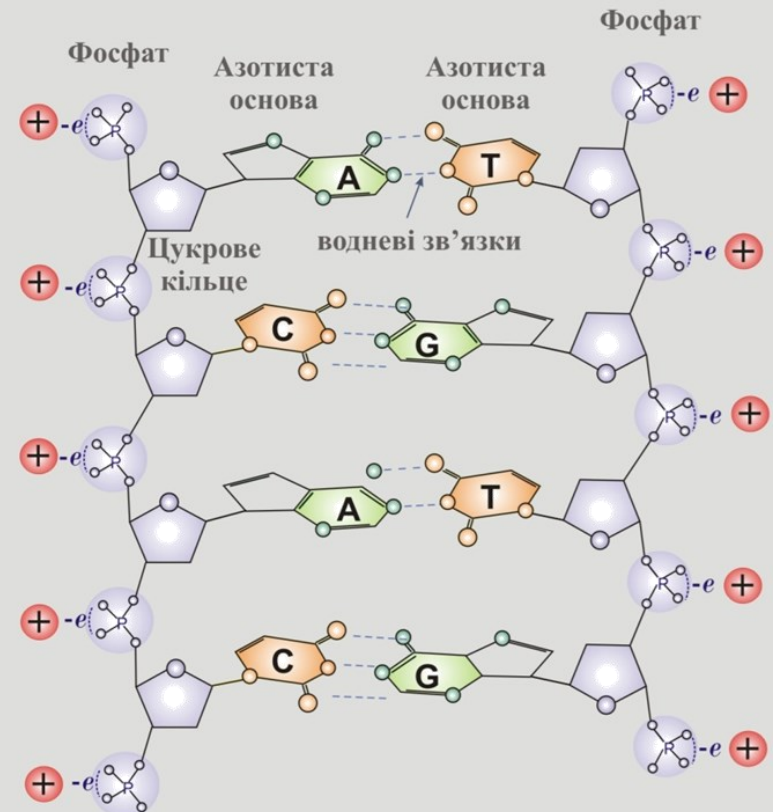
Ю. П. Благой, О. Н. Веселков, С. Н. Волков, Д. М. Говорун, М. П. Євстєрнєєв, Р. О. Жураківський, О. І. Корнеюк, В. Я. Малєєв, М. О. Семенов, В. О. Сорокін, В. М. Харкянєн, Л. М. Христофоров, А. В. Шестопалова. Принципи молекулярної організації і структурної динаміки біополімерів, (Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Харків, 2011).

Стабілізація подвійної спіралі ДНК протийонами

Гідратна оболонка ДНК



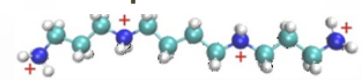
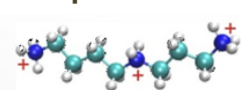
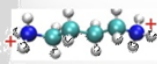
Нейтралізація фосфатних груп



A multitude of species interacting Протийони ДНК

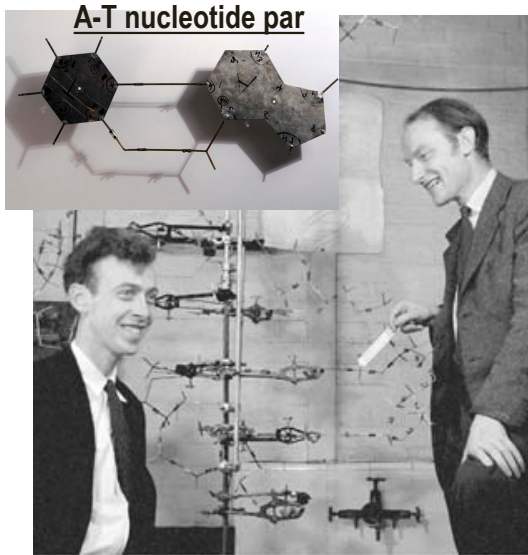
this so-called “most important molecule” is **putrescine²⁺**

J.G. Hedley, K. Coshic, A. Aksimentiev, A.A.



Методи моделювання

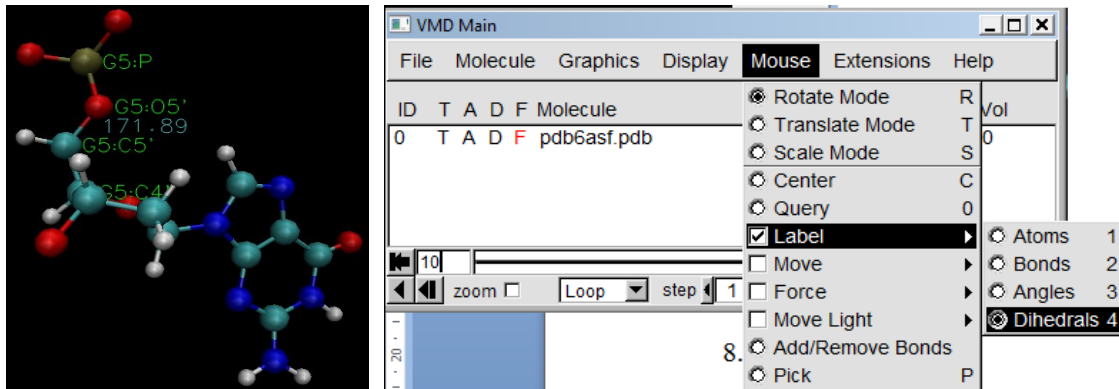
The first modeling of the DNA double helix structure



Computational cluster Bogolyubov Institute for Theoretical Physics



Visualization program VMD



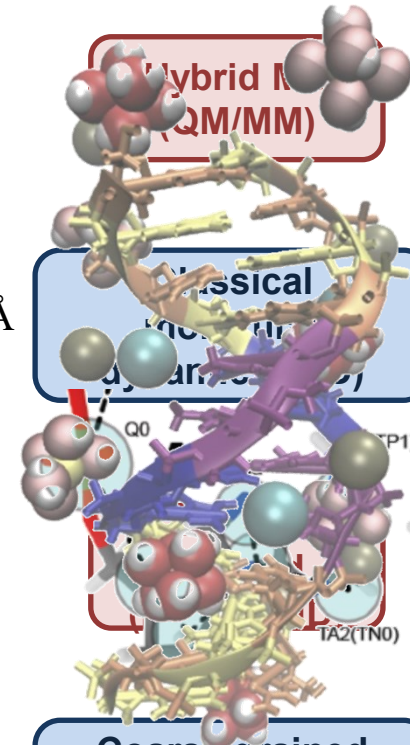
Levels of modeling

Size
 $\sim 10 \text{ \AA}$

Quantum
chemistry
(HF, DFT, MP#)

Time
 $\sim 10 \text{ fs}$

$\sim 100 \text{ \AA}$



$\sim 10^4 \text{ \AA}$

Coarse grained
molecular
dynamics (CG MD)

$\sim 1 \text{ \mu s}$

$\sim 1 \text{ ms}$

Моделювання ДНК на різних рівнях організації

Реальна система



Врахування електронних ефектів

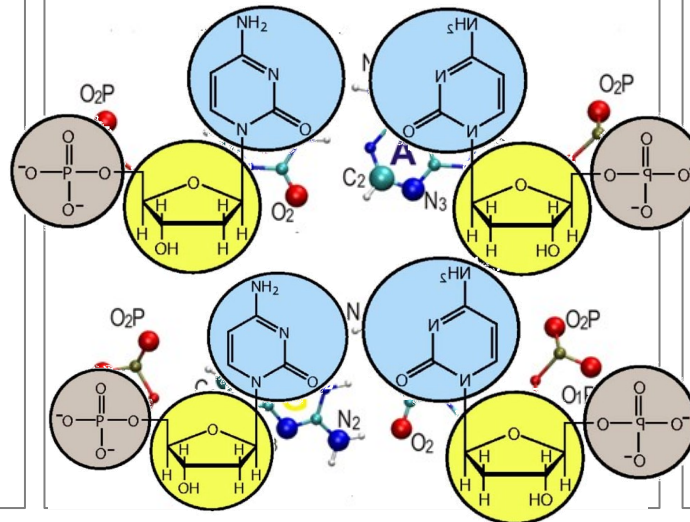
Schrödinger equation

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$$

Атомний рівень



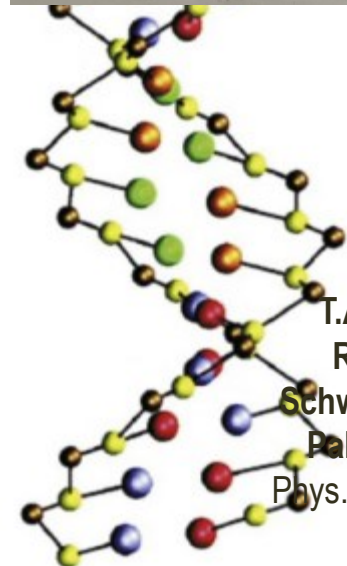
© Sofia P.



Крупнозернисті моделі



© Sofia P.



T.A. Knotts, N.
Rathore, D.C.
Schwartz, J.J. de
Pablo J. Chem.
Phys. 126, 084901
2007

Становлення молекулярної динаміки ДНК: 80 – 90-ті роки



Peter Kollman
(1944-2001)

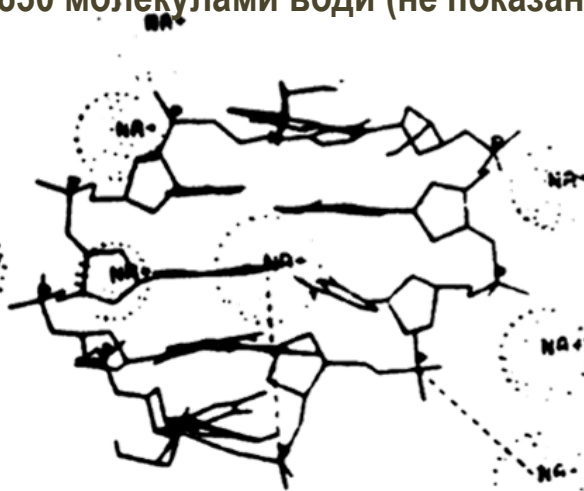
AMBER

G. L. Seibel, U. C. Singh, P. A. Kollman

A molecular dynamics simulation of double-stranded B-DNA

counterions and water. Proc. Natl. Acad. Sci. USA Vol. 82, 6540, (1985)

Фрагмент ДНК d(CGCGA) з протийонами Na^+ та 830 молекулами води (не показано), траєкторія ~0,1 нс



Michael Levitt
(1947)

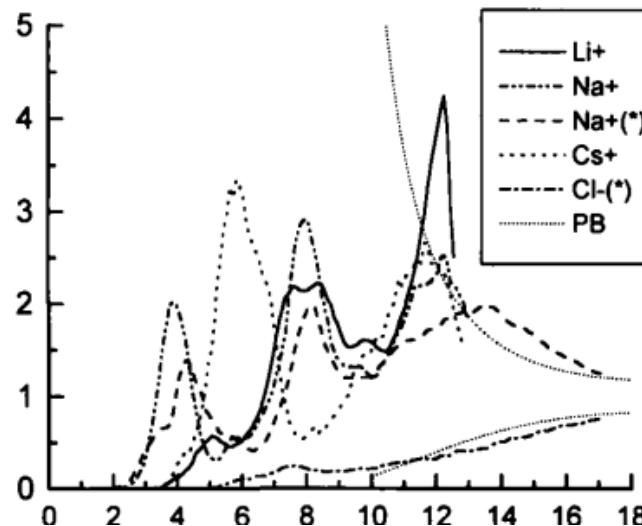
NAMD



Klaus Schulten
(1947-2016)

Радіальні функції розподілу для іонів відносно осі подвійної спіралі ДНК

Lyubartsev A.P., Leontidis A.

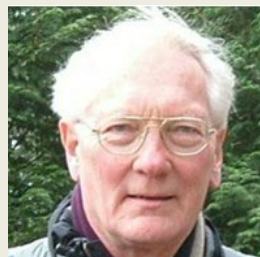


2013
for "the development of multiscale models for complex chemical systems"



Arieh Warshel
(1940)

GROMACS



Herman Berendsen
(1934-2019)

simulations of DNA in solution with different counterions. J. Biomol. Struct. Dyn. Vol. 16, 579 (1998)

CHARMM



Martin Karplus
(1930)

Моделювання фізичних властивостей ДНК в Україні



Олександр Давидов
(1912-1993)

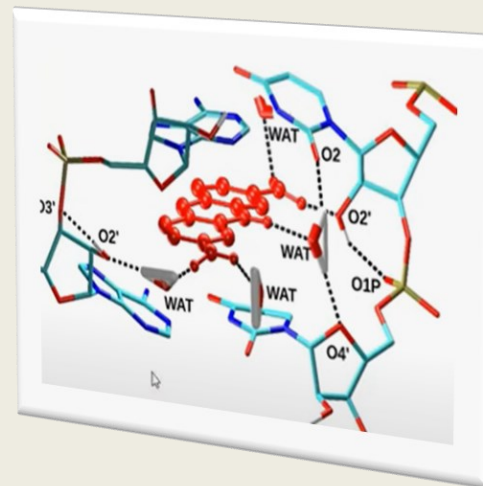
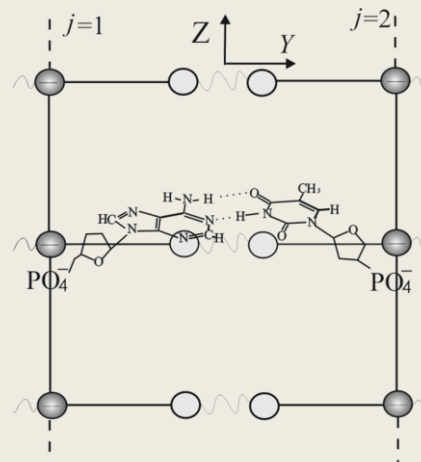
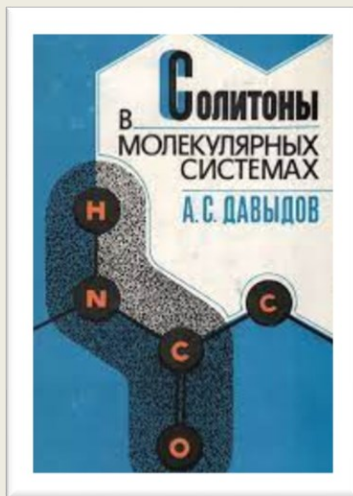


Віктор Данілов
(1935-2014)



Дмитро Говорун
(1950-2020)

Фізичні основи моделювання біомолекул, гідратної оболонки та взаємодії з біологічно активними речовинами



Сергій Волков



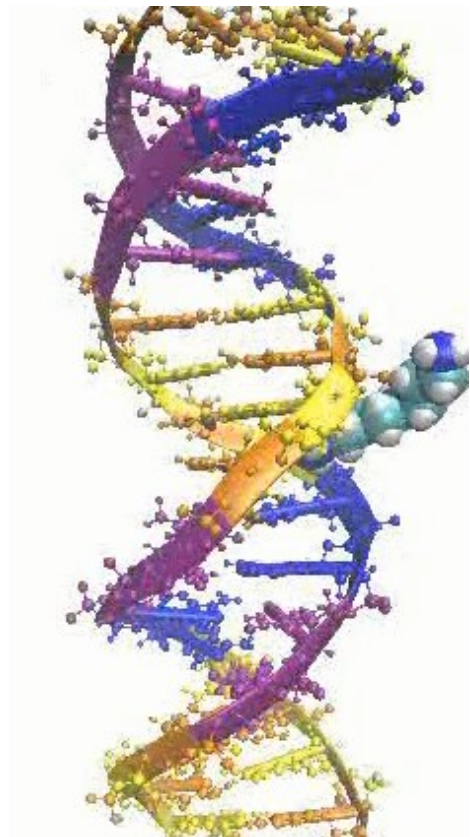
Володимир Малєв
(1930-2018)



Ганна Шестопалова

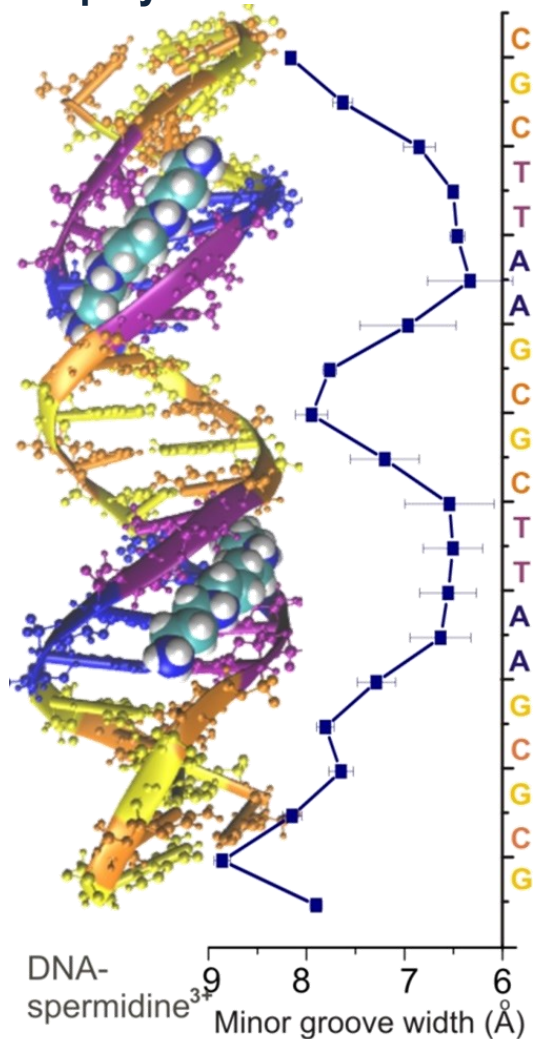
Взаємодія протийонів з ДНК

Localization of spermidine³⁺ in the DNA minor groove

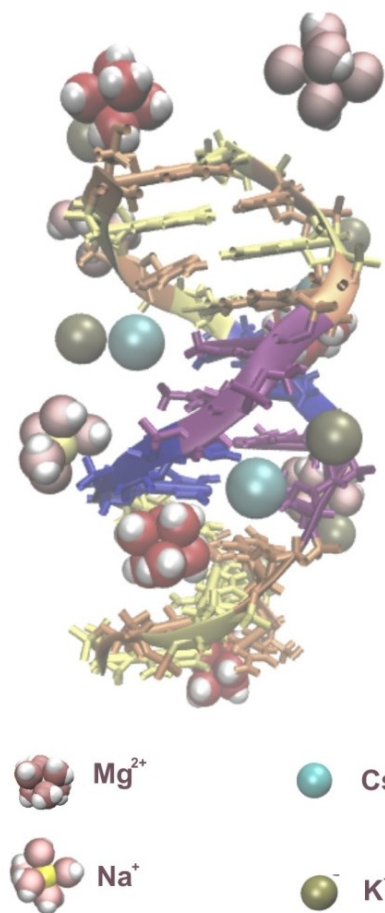


Perepelytsya S., Uličný J., Laaksonen A., Mocci F. *Nucl. Acids Res.* **47**, 6084 (2019)

Sequence-specific interaction of polyamines with DNA



Effects of hydration of meal counterions

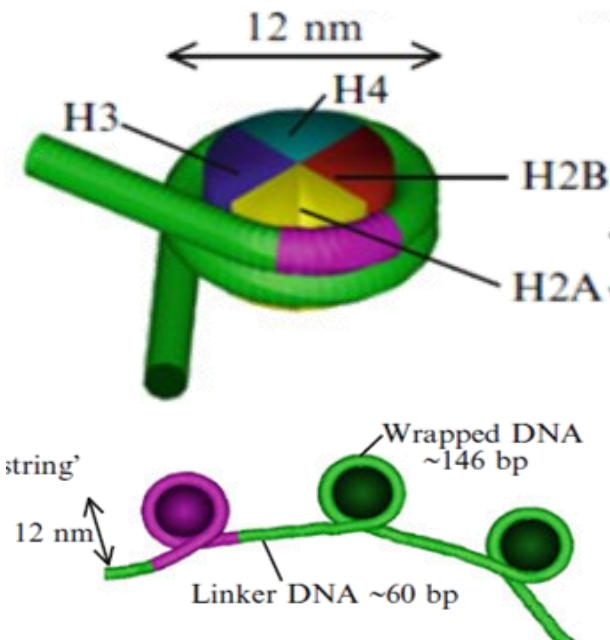


Perepelytsya S. *J. Mol. Model.* **24**, 171 (2018)
Ukr. J. Phys. **65**, 510 (2020).

ДНК в біології і нанотехнологіях

Parameters of natural DNA

Virus λ	17 μm
E.Coli	1,6 mm
Mouse	1,1 m
Human	1,1 m
Salamander	13,3 m



Schlick T. Molecular Modeling and Simulation. NY: Springer (2002).

DNA as a material

DNA and oil in the world

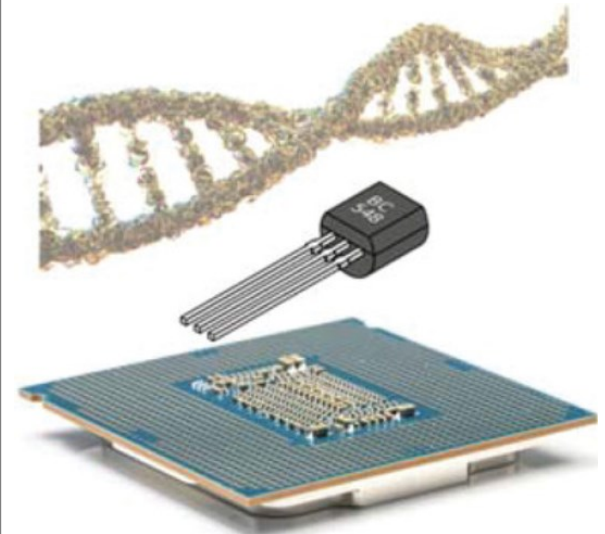
	Mbp	kg
*DNA	$5.3 \cdot 10^{31}$	$5.5 \cdot 10^{13}$
WikiOil		$2.2 \cdot 10^{14}$

$$\text{DNA} / \text{Oil} \approx 0.25$$



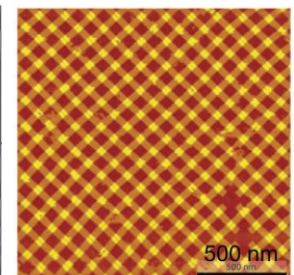
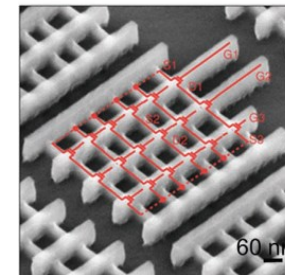
H.K.E. Landenmark, D.H. Forgan, C. S. Cockell. An Estimate of the Total DNA in the Biosphere
PLOS Biology | 2015

DNA nanoelectronics



Transistor

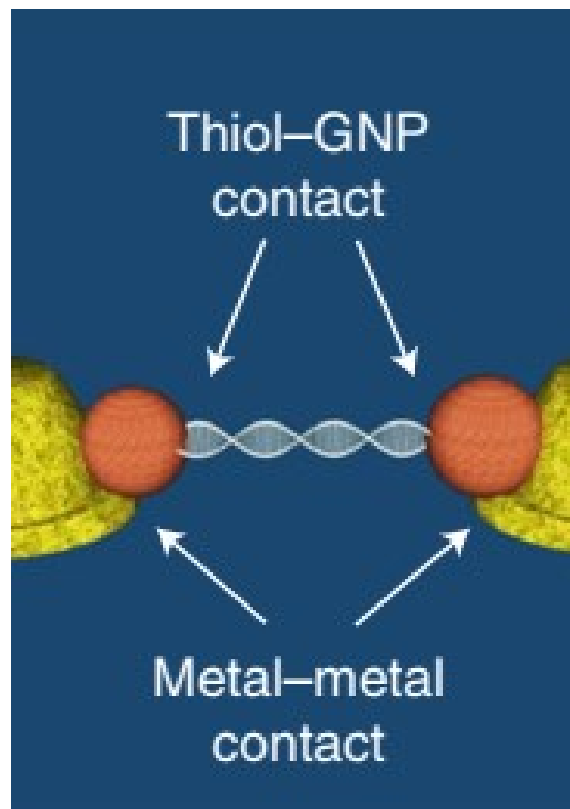
DNA patterns



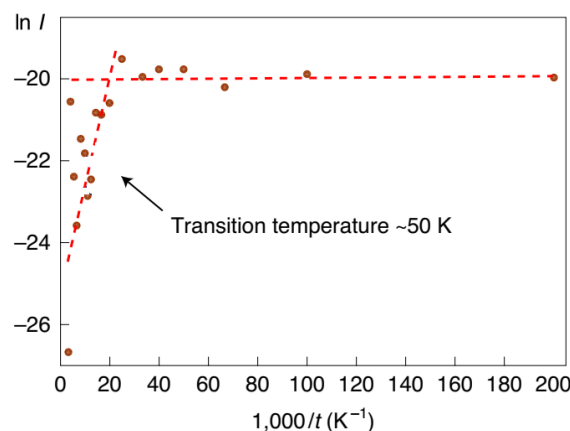
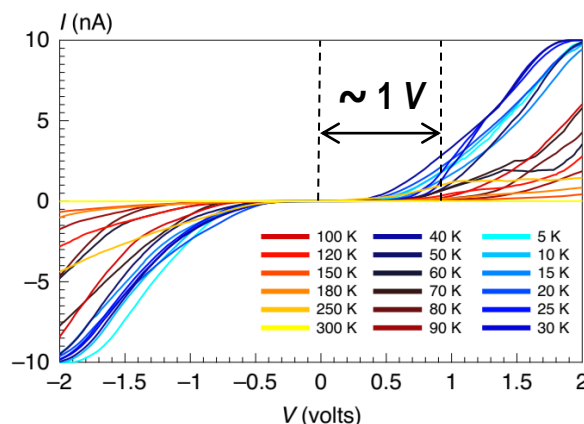
L. Hui, R. Bai, H. Liu, DNA-Based Nanofabrication for Nanoelectronics. *Adv. Funct. Mater.* 32, 2112331. (2022)

Внутрішня провідність ДНК

Schematic side view of the metal–dsDNA–metal junction

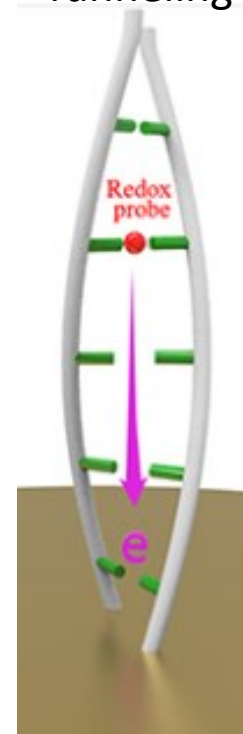


$I - V$ Characteristics

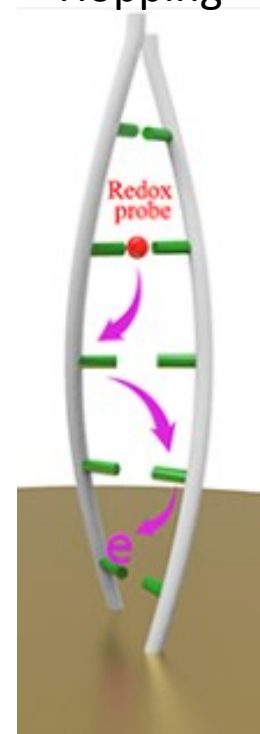


Mechanism of electron transport in DNA

Tunneling



Hopping

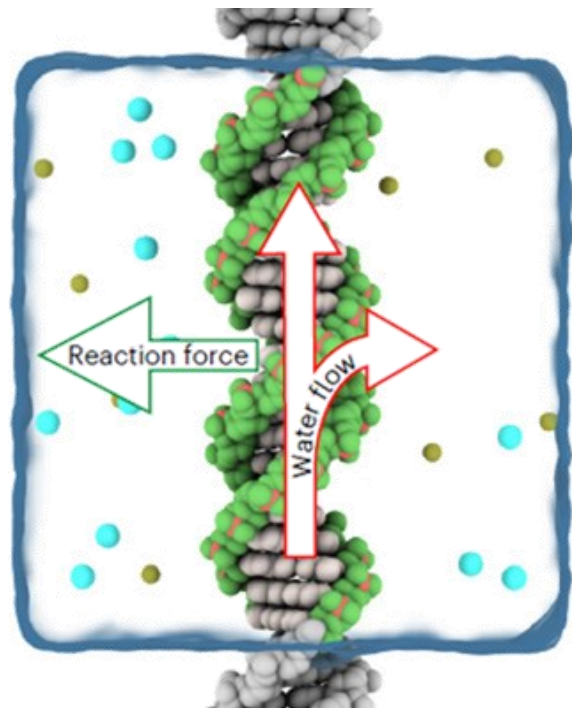


R. Zhuravel, H. Huang, G. Polycarpou, S. Polydorides, P. Motamarri, L. Katrivas, D. Rotem, J. Sperling, L. A. Zotti, A. B. Kotlyar, J. C. Cuevas, V. Gavini, S. S. Skourtis, D. Porath. Backbone charge transport in double-stranded DNA. *Nature Nanotechnology*. 15, 836 (2020).

Huiqian Zhou, Han Lin, Qi Wang, Tingting Hao, Yufang Hu, Sui Wang, and Zhiyong Guo *Analytical Chemistry* 94 (44), 15324-15331 (2022)

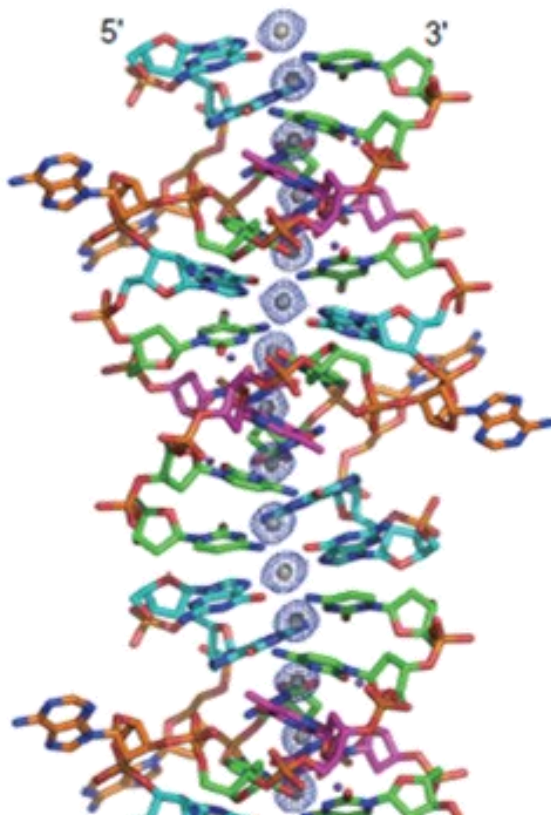
Застосування властивостей ДНК в нанотехнологіях

DNA double helix as a tiny electromotor



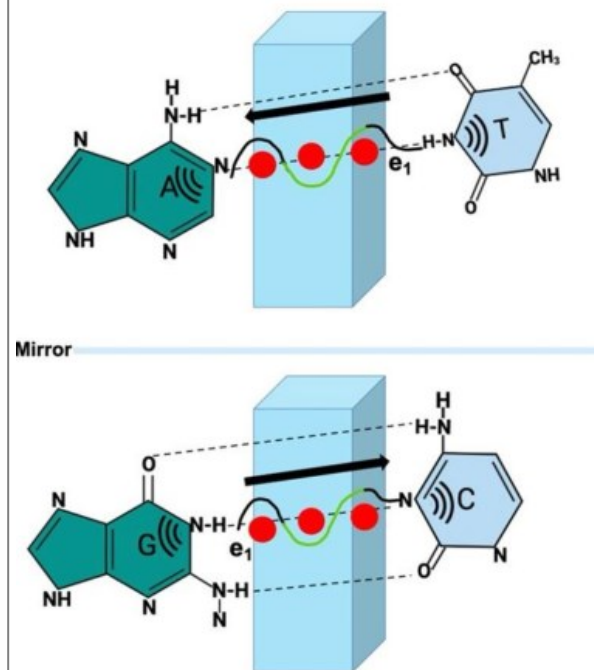
C. Maffeo, L. Quednau, J. Wilson¹, A. Aksimentiev. *Nature Nanotechnology* (2022) <https://doi.org/10.1038/s41565-022-01285-z>

Chain of Ag atoms in DNA



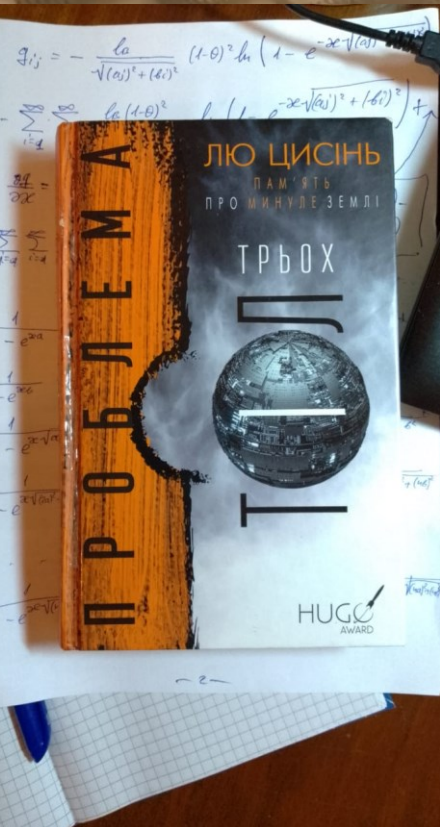
J. Kondo, Y. Tada, T. Dairaku, Y. Hattori, H. Saneyoshi, A. Ono, Y. Tanaka. A metallo-DNA nanowire with uninterrupted one-dimensional silver array. *Nature Chem.* (2017)

DNA as a perfect quantum computer



R.R. Aroche, Y. M. Ortiz García, M. A. Martínez Arellano, A. R. Leal. DNA as a perfect quantum computer based on the quantum physics principles *Scientific Reports* (2024) 14:11636

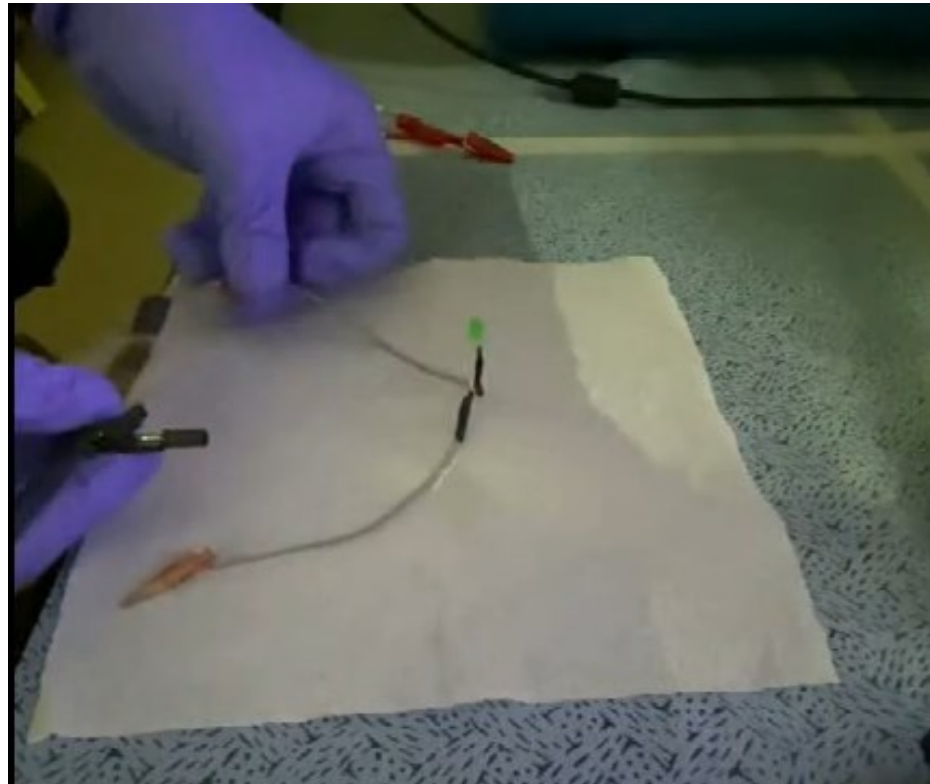
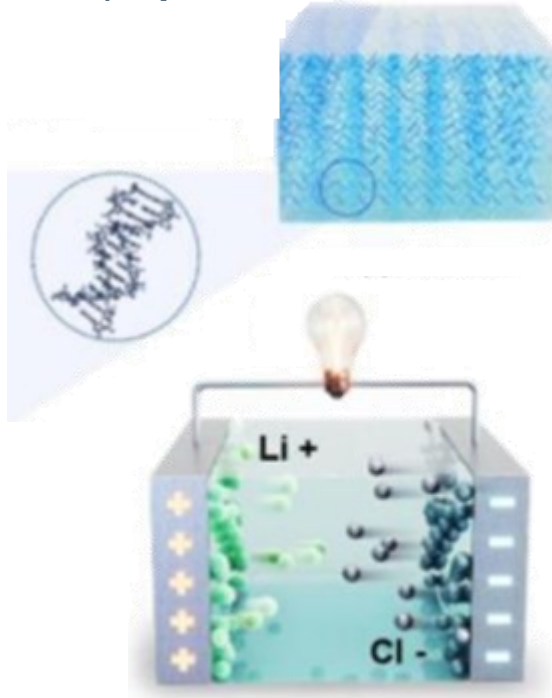
Біологічний комп'ютер у фантастичному фільмі «Задача 3 тіл»



NETFLIX

Застосування ДНК в Li-йонних батареях

Li-DNA supercapacitor
(Republic of Korea)

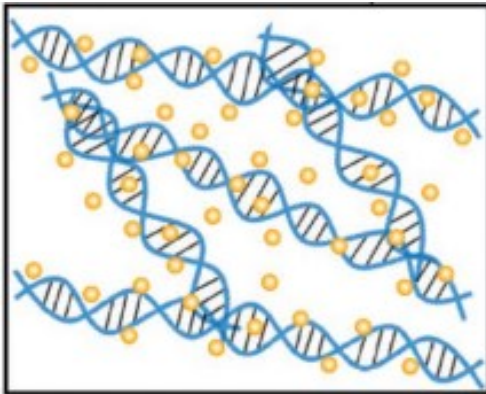
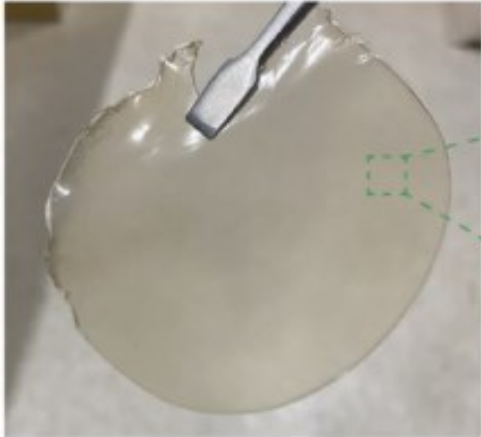


S. B. Mitta, J. Kim, H. H Rana, S. Kokkiligadda, Y. T. Lim, S. Ho Bhang, Ho S. Park, S. Ho Um, A biospecies-derived genomic DNA hybrid gel electrolyte for electrochemical energy storage, PNAS Nexus, Volume 3, Issue 6, June 2024, pgae213, <https://doi.org/10.1093/pnasnexus/pgae213>

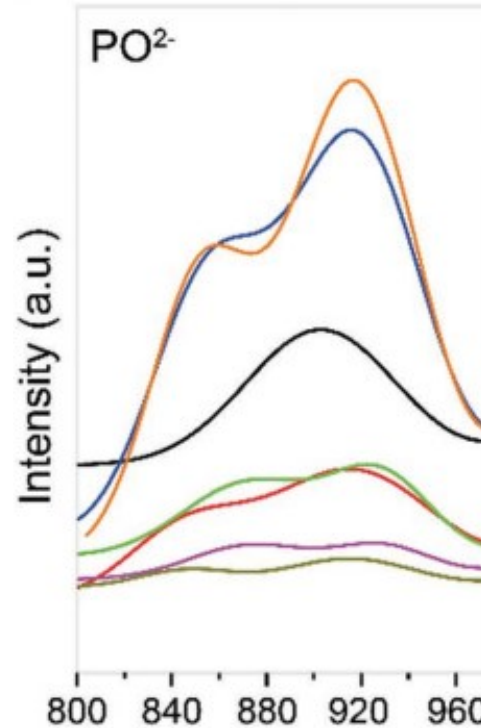
S. B. Mitta, R. Harpalsinh, J. Kim, H. S. Park, S. H. Um. Flexible Supercapacitor with a Pure DNA Gel Electrolyte Adv. Mater. Interfaces 2022, 9, 2200133

Структура гелю Li-ДНК

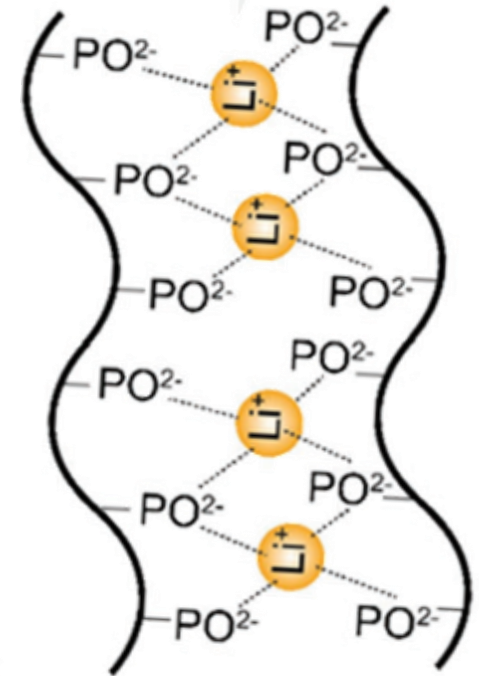
Гель Li-ДНК



Раманівські спектри Li-ДНК



Пропонована модель структури гелю



S. B. Mita, R. Harpalsinh, J. Kim, H. S. Park, S. H. Um. Flexible Supercapacitor with a Pure DNA Gel Electrolyte Adv. Mater. Interfaces 2022, 9, 2200133

Ініційований експеримент в Україні:

КНУ: д.ф.-м.н. Максим Лазаренко, д.хім.н. Сергій Алексєв,

КНУ: студ. Марія Сосновська

КПІ: студ. Ольга Власюк, Анна Стецюк; (КАУ)



Фізичний факультет КНУ

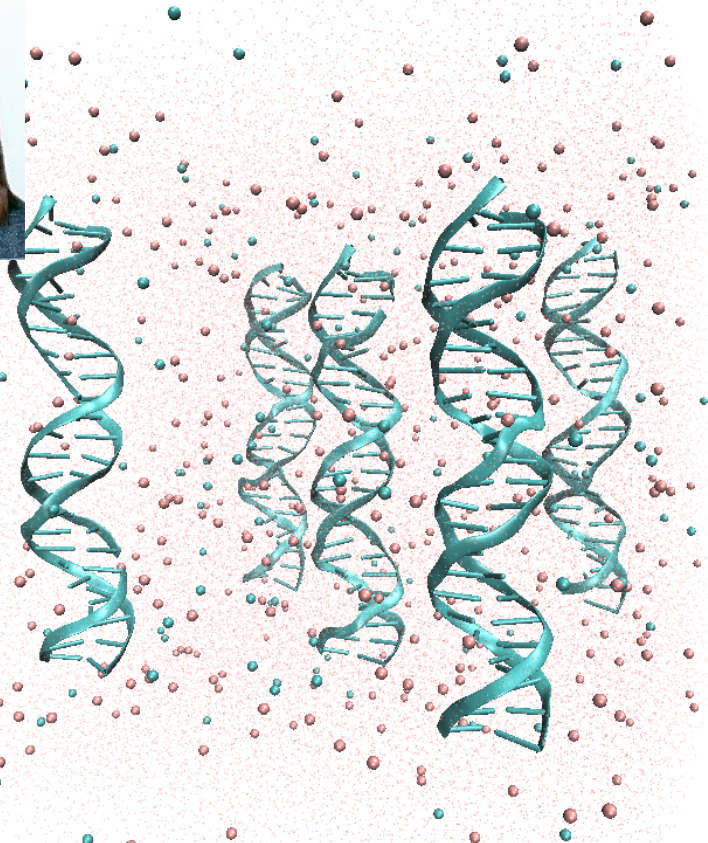


Молекулярно-динамічне моделювання ДНК у водному розчині LiCl

Система ДНК в 0.1 М LiCl

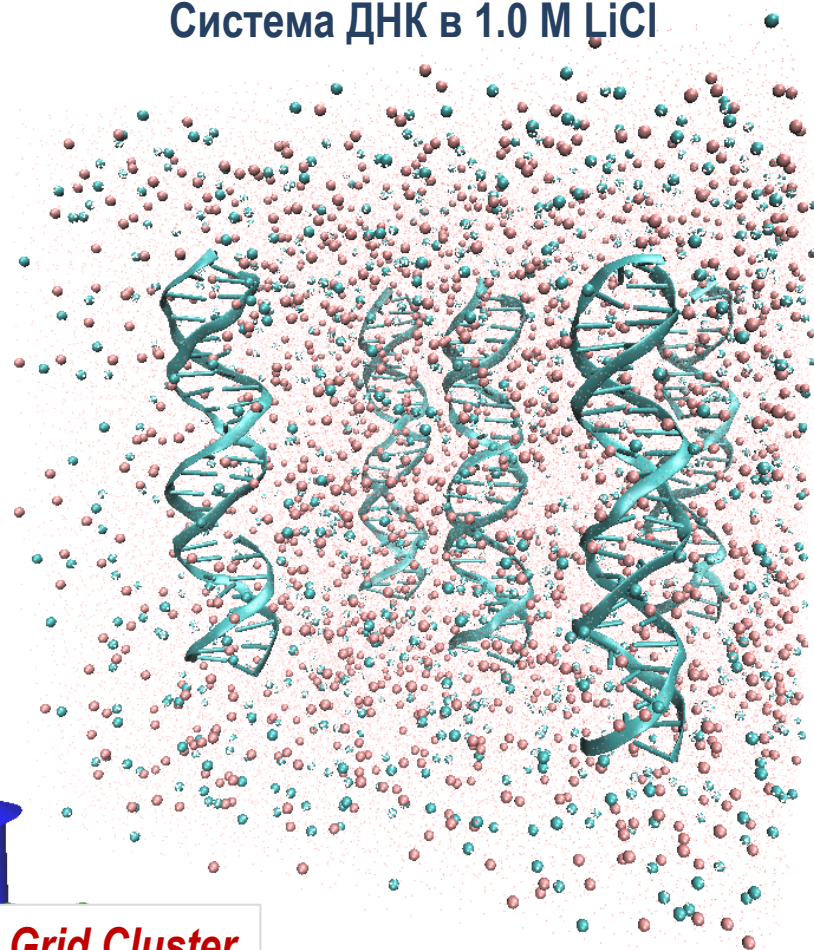


Tetiana
Bubon



BITP Computational Grid Cluster

Система ДНК в 1.0 М LiCl

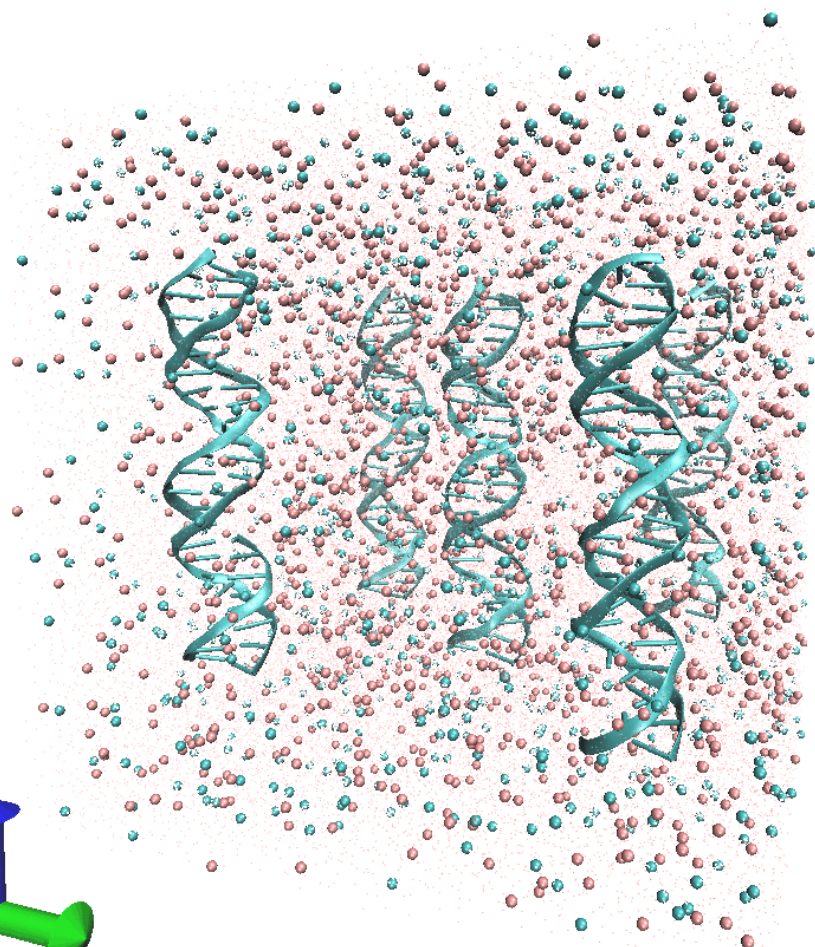


5 DNA molecules, Box size: 120 Å x 120 Å x 120 Å,
Nucleotide sequence: CGCGAATTCGCGCGAATTCGCG

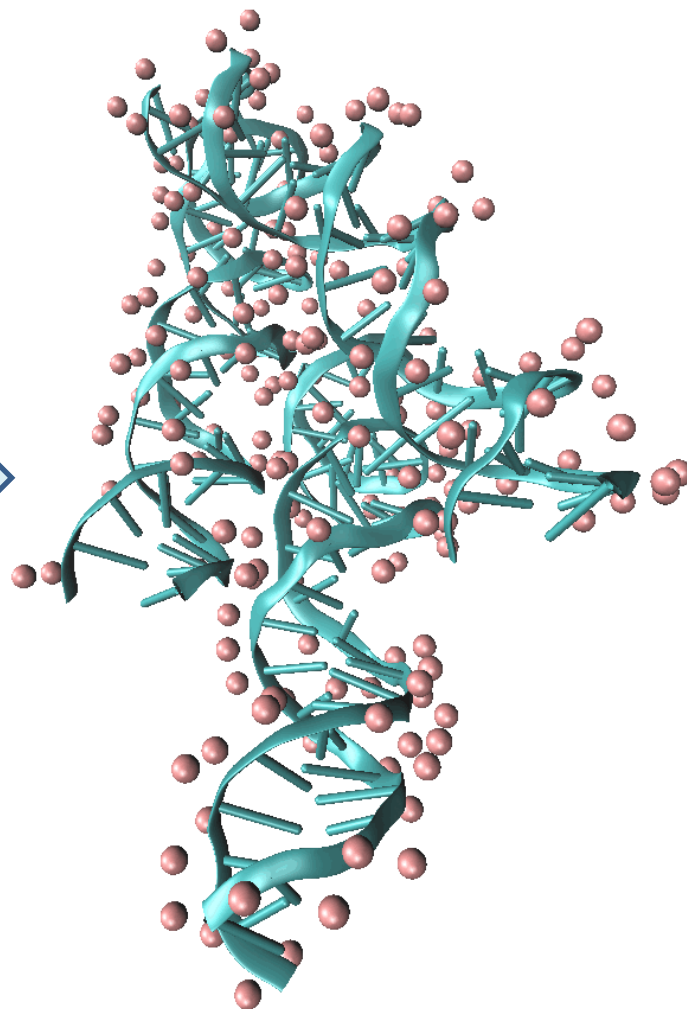
GROMACS, >200 ns equilibrations (in progress)
AMBER BSC1 force field

Формування ДНК-ДНК контактів в розчині LiCl

Система ДНК в 1.0 М LiCl

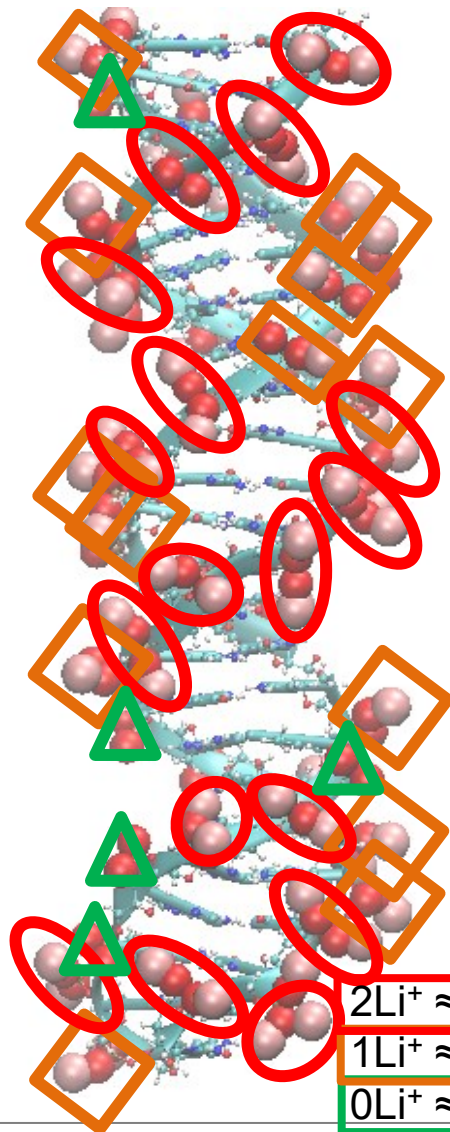


Спостереження агрегації ДНК



Перезарядка ДНК протийонами Li^+

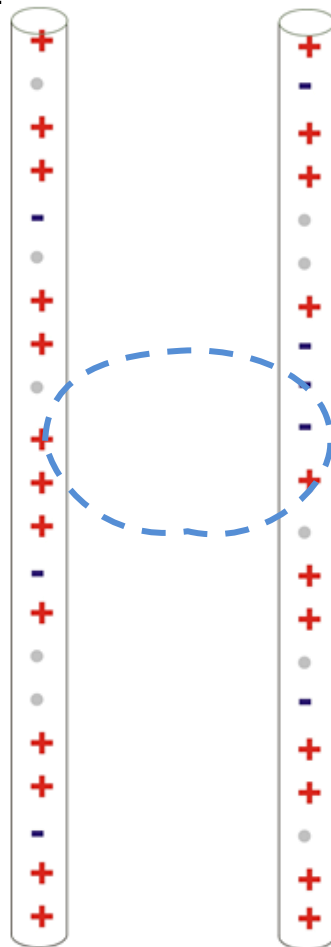
Complexes of PO_4^- with Li^+ ions



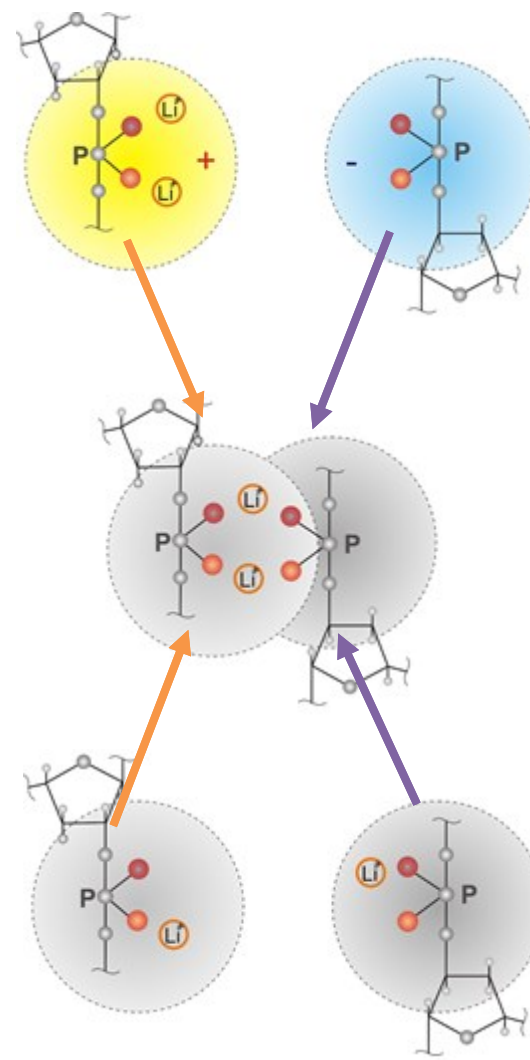
DNA overcharging

DNA1

DNA2

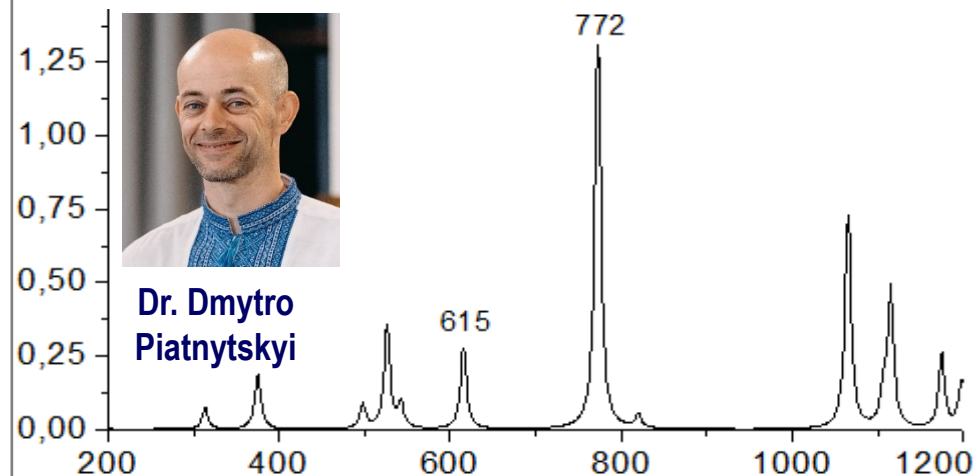


Complex formation

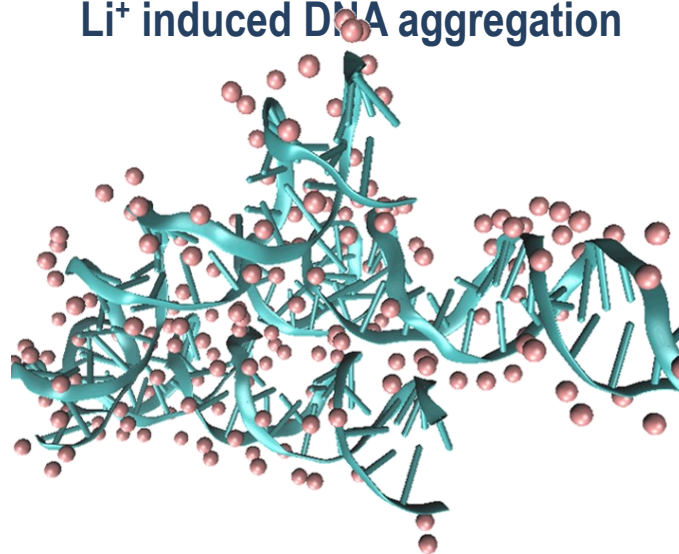


Структура контактів ДНК-Li-ДНК

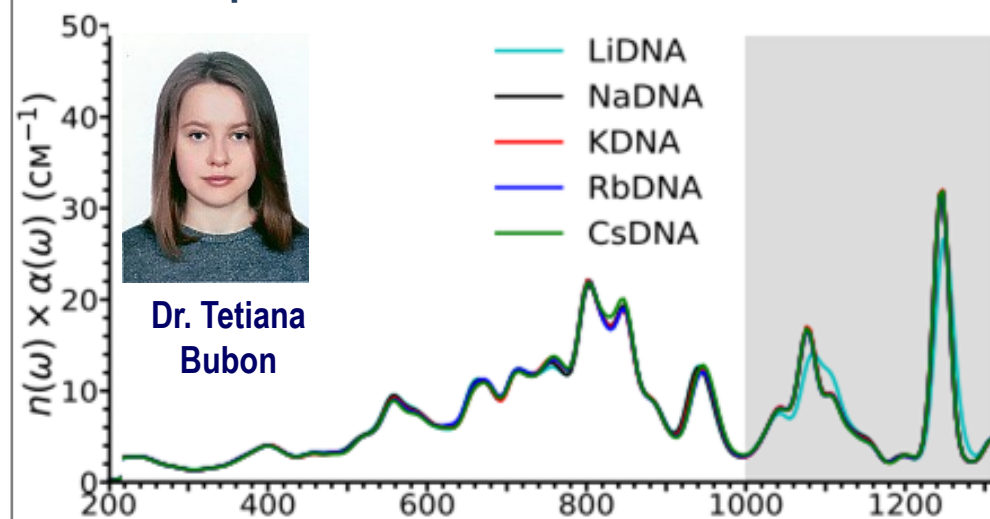
Calculated Raman spectra of Li-PO₄ complexes



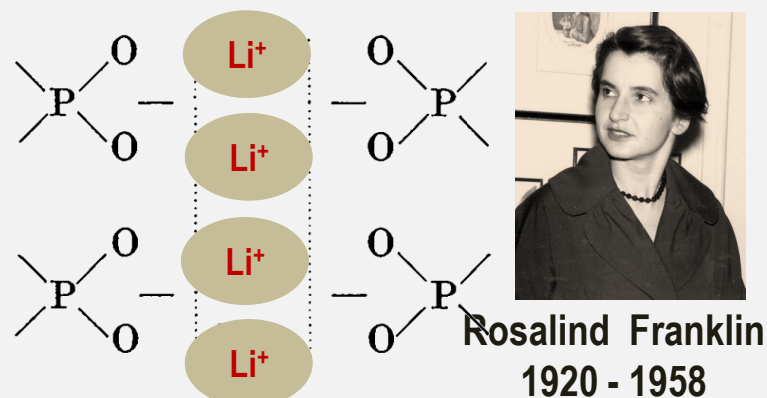
Li⁺ induced DNA aggregation



IR spectra of Li-DNA from MD simulations

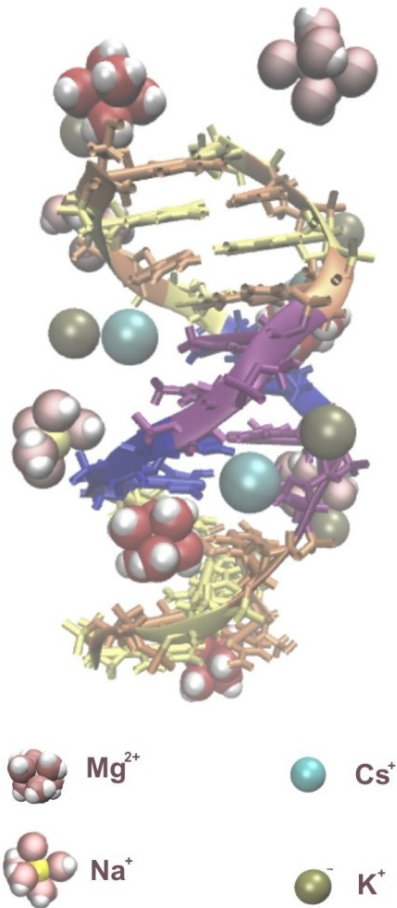


Franklin's crosslinks



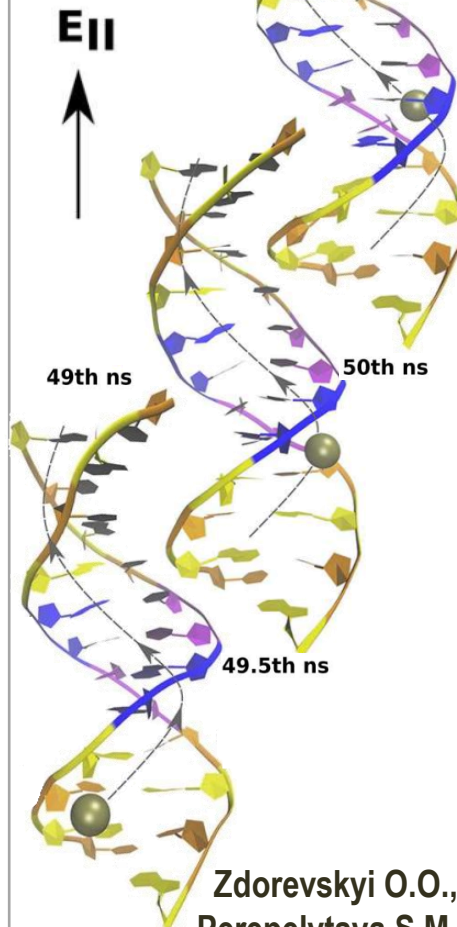
Підсумок

1. Ефекти гідратації протийонів ДНК



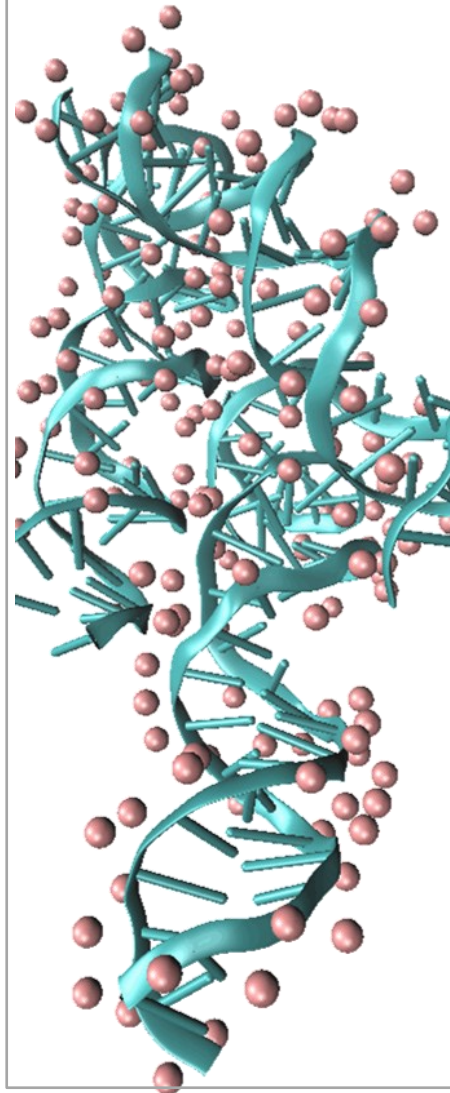
Perepelytsya S.
J. Molec. Model. **24**, 171 (2018)
Ukr. J. Phys. **65**, 510 (2020).

2. Протийони ДНК електричного полі

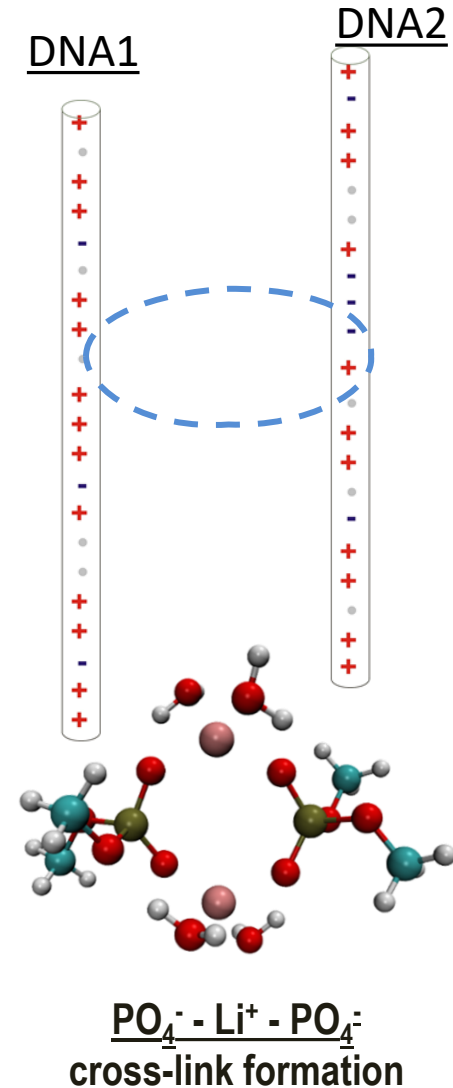


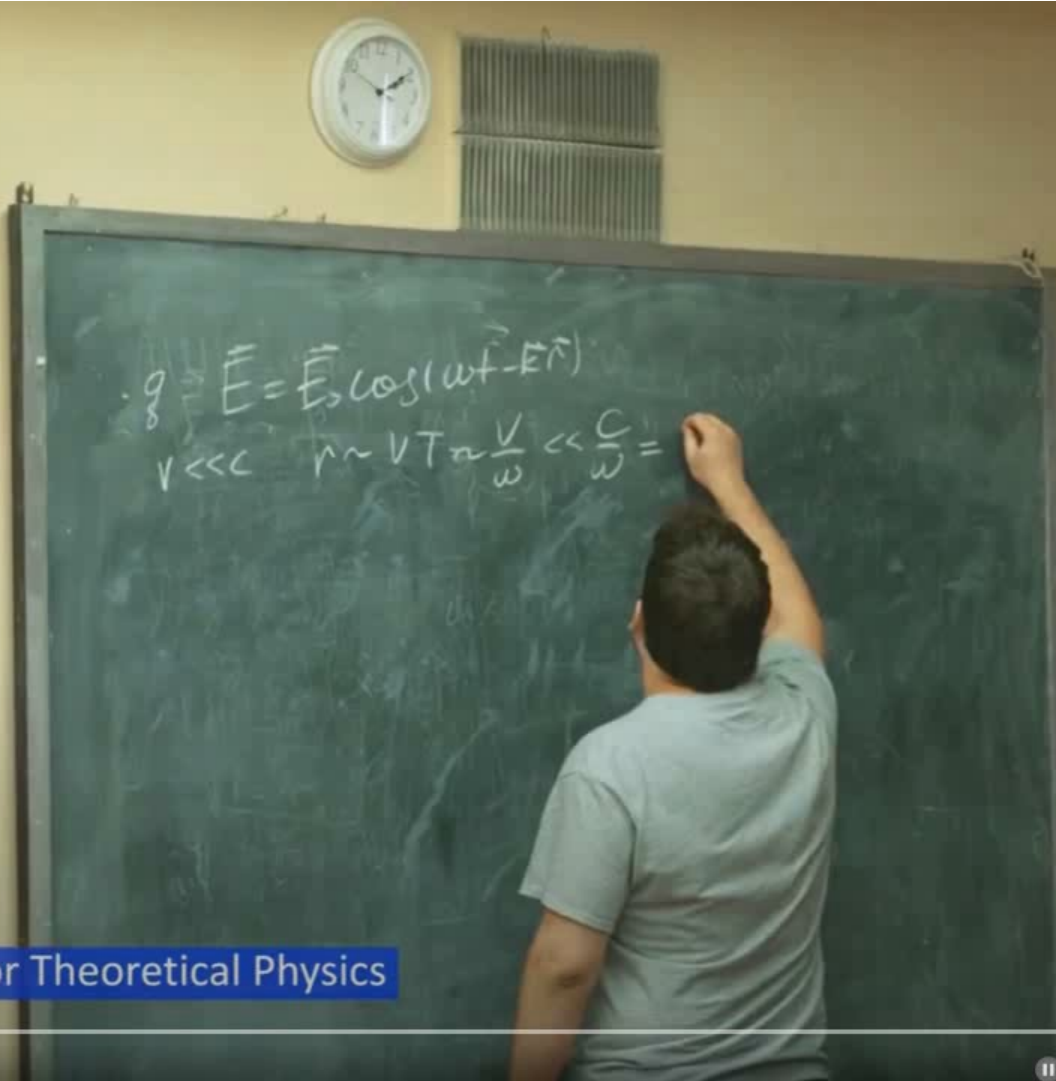
Zdorevskiy O.O.,
Perepelytsya S.M.
Eur. Phys. J. E **43**: 77 (2020)

3. Конденсація ДНК однозарядними іонами



4. Провідність ДНК та конденсація





Bogolyubov Institute for Theoretical Physics

Kyiv, Ukraine

0:03 / 2:40





Кафедра теоретичної і математичної фізики КАУ



Дякую за увагу!

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова
Національної академії наук України