**ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΕΥΣΤΑΘΕΙΑΣ ΤΗΣ ΔΙΠΛΗΣ ΕΛΙΚΑΣ ΤΟΥ DNA ΣΕ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΑ ΜΙΚΤΩΝ ΔΙΑΛΥΤΩΝ ΜΕ ΜΕΘΟΔΟΥΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ**

**Τ. Αλεξίου1**

1 Faculty of Physics, University of Vienna, Austria

*\** alexiou.terpsichori@univie.ac.at

**ΠΕΡΙΛΗΨΗ**

Σε μια πρόσφατη πρωτοποριακή πειραματική μελέτη φασματοσκοπίας και οπτικών λαβίδων (optical tweezers), φαινόμενα ισχυρής διατάραξης της στοίβαξης των βάσεων μορίων DNA διπλής έλικας αναφέρθηκαν για πρώτη φορά, σε συγκεκριμένα ημι-υδροφοβικά μέσα διάλυσης[1]. Σε μίγματα νερού με μεγάλη συγκέντρωση σε αιθέρες αιθυλενογλυκόλης παρουσιάστηκαν φαινόμενα ενισχυμένης διαμήκους αναπνοής (longitudinal base breathing) των βάσεων DNA, με πληθώρα πιθανών επιπτώσεων για τις στερεοχημικές και λειτουργικές αλληλεπιδράσεις του DNA με πρωτεΐνες και φαρμακευτικές ουσίες. Σε συνέχεια πρόσφατων εργασιών για υδατικά διαλύματα DNA[2,3], στην παρούσα εργασία διερευνάται μέσω μεθόδων μοριακής προσομοίωσης η δομική ευστάθεια γραμμικών και κυκλικών μορίων DNA διπλής έλικας σε διμερή υδατικά μίγματα, με μεταβαλλόμενη περιεκτικότητα σε αιθέρες αιθυλενογλυκόλης (0-50% w/w) μικρού μοριακού μήκους. Ιδιαίτερη σημασία έχει η διερεύνηση της επίδρασης υδρόφιλων και υδρόφοβων τερματικών ομάδων (υδροξυλ- και μεθυλ- ομάδων) των αλειφατικών αιθέρων. Tα αποτελέσματα των μοριακών προσομοιώσεων αξιολογούνται στη βάση διαθέσιμων πειραματικών δεδομένων καθώς επίσης και βάσει των προβλέψεων θεωρητικών προσεγγίσεων για την ελεύθερη ενέργεια ανάμιξης μιγμάτων διαλυτών (θεωρίες τύπου Kirkwood- Buff) [4].

**ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ:** DNA stability, Molecular Simulations, binary liquid mixtures

**ΑΝΑΦΟΡΕΣ**

[1] Feng, B., Sosa, R.P., Mårtensson, A. K. F., *et al*. (2019). *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A*. 116 (35): 17169–17174.

[2] Alexiou, T.S., Mintis, D.G., Mavrantzas, V. G. (2020). *Macromolecules*. 53, (15): 6135–6150.

[3] Alexiou, T.S., Alatas, P.V., Tsalikis, D.G., Mavrantzas, V. G. (2020). *Macromolecules*. 53, (14): 5903–5918.

[4] Ganguly, P., Van Der Vegt, N. F. A (2013). *J. Chem. Theory Comput.* 9 (3): 1347–1355.