

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРЫ НУКЛЕОТИДНОЙ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ НА ОРГАНИЗАЦИЮ ПОСТОЯННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА ДВОЙНЫХ СПИРАЛЕЙ ДНК

Коваль А.А.¹, Кабанов А.В., Комаров В.М.

Институт биофизики клетки РАН, Россия, 142290, г. Пущино, ул. Институтская, 3,
+79299804698, anya.a.koval@gmail.com

Исследование проявлений взаимодействия электрических полей в биологических молекулярных системах остается одной из важнейших проблем современной биофизики. С ней связана весьма интересная задача о механизме точного молекулярного узнавания конкретным белком определенных последовательностей нуклеотидов, что необходимо для осуществления ряда биологически важных функций (транскрипция, репликация и т.д.). Здесь лимитирующим моментом выступает специфика распределения электрических зарядов во взаимодействующих молекулах.

Ранее было установлено существование довольно больших величин постоянных электрических дипольных моментов μ (величиной более сотни, а то и тысяч Дебай) у одиночных молекул полипептидов и двойных спиралей ДНК [1]. Возможно, они играют немаловажную роль в процессе белок-нуклеинового узнавания. Но, если для белков наличие в структуре дипольных моментов не вызывает сомнения, то для случая двойных спиралей нуклеиновых кислот это обстоятельство остается далеко не очевидным. Считается, что постоянный электрический дипольный момент молекулы ДНК в модели Уотсона и Крика должен быть незначительным, вследствие взаимной компенсации дипольных моментов плоскосвязанных пар оснований в структуре антипараллельной двойной спирали. Поэтому появление больших величин дипольных моментов μ в молекулах нуклеиновых кислот остается все еще под большим вопросом.

В данной работе представлены результаты развития идеи о роли внутреннего, непланарного структурного полиморфизма уотсон-криковского спаривания оснований в структуре ДНК в иницировании большого нескомпенсированного электрического дипольного момента вдоль оси двойной спирали. Используя полуэмпирический квантово-химический РМЗ метод, а также методы молекулярной механики, приводятся оценки величин дипольных моментов модельных нуклеотидных цепей разного нуклеотидного состава и длины, взятых из базы данных Банка NDB.

Показано, что значение постоянного электрического дипольного момента вдоль оси спирали, даже при появлении незначительных отклонений Н-связывания пар от строгой планарности, всегда имеет тенденцию к возрастанию своей величины с увеличением длины спирали. Средний прирост дипольного момента спирали на каждую комплементарную АТ- или GC-пару составляет ~ 1.5 Дебай.

Литература.

1. Porschke D. Macrodipoles Unusual electric properties of biological macromolecules // *Biophysical Chemistry* Vol. 66, No. 2-3, Year 1997, Pp. 241 – 257.