

## УТОЧНЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДВУХЦЕПОЧЕЧНОЙ ДНК

Якушевич Л.В.<sup>1</sup>, Краснобаева Л.А.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Институт биофизики клетки РАН, Россия, 142290,  
г. Пущино, Институтская ул. 3, Тел.(0967) 73-49-63,  
e-mail: yakushev@icb.psn.ru

<sup>2</sup>ГБОУ ВПО Сибирский государственный медицинский университет,  
Россия, 634050, г. Томск, Московский тракт, 2

<sup>3</sup>ГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский государственный  
университет», Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина 36,  
e-mail: larisa@phys.tsu.ru

Известно, что для моделирования конформационной подвижности молекулы ДНК необходимо иметь полный набор параметров, которые характеризуют внутренние движения основных атомных групп (сахаров, фосфатных групп, оснований), и взаимодействия между ними. В моделях, имитирующих угловые колебания оснований, этот набор включает моменты инерции аденина, тимина, гуанина и цитозина ( $I_A, I_T, I_G, I_C$ ), расстояния между центрами масс оснований и сахаро-фосфатной цепочкой ( $R_A, R_T, R_G, R_C$ ), коэффициент жесткости сахаро-фосфатной цепочки ( $K$ ), а также коэффициенты  $k_{AT}$  и  $k_{GC}$ , характеризующие взаимодействия между основаниями, внутри пар AT и GC, соответственно [1]. Оценка этих параметров и установление точных соотношений между ними особенно важны при моделировании реальных (неоднородных) последовательностей ДНК.

Однако, во многих работах по конформационной динамике оценкам динамических параметров ДНК уделяется недостаточно внимания. Зачастую различия в их значениях для разных последовательностей ДНК игнорируются, а многие старые приближенные оценки давно не уточнялись.

В данной работе представлен алгоритм оценки различных динамических параметров ДНК. В качестве примера приводится применение этого алгоритма для расчета полного набора параметров, необходимых для моделирования угловых колебаний оснований в последовательности гена, кодирующего интерферон alpha 17 (IFNA17).

### Литература.

1. Yakushevich L.V. Nonlinear Physics of DNA - Wiley, Weinheim, 2004. 190 pp.