

КОНФОРМАЦИОННАЯ ДИНАМИКА ДНК И МЕТОД МАКЛАФЛИНА-СКОТТА

Якушевич Л.В., Краснобаева Л.А.^{1,2}

Институт биофизики клетки ФИЦ НЦБИ РАН, Россия, 142290, г. Пущино,
Институтская ул. 3, (496)7739252, kind@mail.ru

¹ФГБОУ ВО Сибирский государственный медицинский университет, Россия, 634050, г.
Томск, Московский тракт 2, (3822)901101,

²ГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский государственный
университет», Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина 36, (3822)529021, kla1983@mail.ru

Настоящий доклад посвящен новому и быстро развивающемуся направлению теоретической биофизики, связанному с использованием метода МакЛафлина-Скотта (МЛ-С) в исследованиях конформационной динамики молекулы ДНК. В отличие от методов молекулярной динамики (МД), метод МЛ-С широко использует аналитические инструменты. Представлены основные свойства и особенности этого метода, приведены примеры успешного решения с его помощью ряда задач биофизики ДНК.

Особое внимание уделяется применению метода МЛ-С для изучения конформационной динамики неоднородных (природных) ДНК. Детально описаны (1) способ разбиения последовательности ДНК на блоки, который позволяет учесть размер, состав и расположение функционально значимых областей, а также (2) квазиоднородное приближение, позволяющее применить к ДНК алгоритмы, разработанные в теоретической физике и нелинейной математике. В работе приводятся результаты авторских исследований методом МЛ-С динамики открытых состояний в промоторных последовательностях A_1 , A_2 , A_3 генома бактериофага T7, в последовательностях генов IFNA17, ADRB2, NOS1, IL-5, в плаزمиде рBR322 и рТТТQ18. Такие открытые состояния играют важную роль в процессах транскрипции, репликации, денатурации, а также передаче структурных изменений и информации вдоль молекулы ДНК. Наиболее ярким примером открытых состояний являются транскрипционные пузыри, представляющие собой небольшие локально расплетенные участки двойной спирали ДНК, которые образуются в начальной стадии процесса транскрипции вследствие взаимодействия РНК полимеразы с промоторными участками последовательности ДНК [1]. Показано как метод МЛ-С используется для расчета скорости движения транскрипционных пузырей, построения 2D и 3D траекторий движения, исследования влияния на это движение внешних воздействий.

В заключительной части работы обсуждаются преимущества, недостатки, новые возможности и перспективы развития метода МЛ-С.

Литература

1. Биохимия. Под ред. Е. С. Северина . - ГЭОТАР-МЕД, Москва, 2004. 768 стр.