

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО УЗНАВАНИЯ БЕЛОК-ДНК В ЛИНЕЙНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Анашкина А.А.¹, Есипова Н.Г.¹, Туманян В.Г.^{1,3} Намиот В.А.²

¹ИМБ РАН, Россия, 119991, Москва, ул.Вавилова, д. 32.

²НИИЯФМ МГУ, 119991, Москва, Ленинские горы, 1, стр. 2

³МФТИ, Россия, 141700, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский
переулок, 9.

Тел.: (499)135-13-92, факс: (499)135-14-05,

E-mail: nastya@imb.ac.ru

В работе предлагается гипотеза, что специфическое взаимодействие, приводящее к распознаванию определенных сайтов на протяженных макромолекулах, таких как ДНК возможно, если между такими сайтами возникает дальнедействующее взаимодействие, обладающее, в то же самое время, достаточно высокой селективностью. Такого рода модель была теоретически разработана ранее в диссертации [1] в общем виде. В работах [2,3] такая гипотеза была предложена для сворачивания белка. Очевидно, что для того, чтобы такие дальнедействующие взаимодействия в принципе могли бы обеспечить «быстрый» поиск необходимых участков цепей, требуется, чтобы узнающие участки цепочек могли бы достаточно свободно перемещаться друг относительно друга и чтобы эти участки взаимодействовали бы между собой гораздо более эффективно, чем те участки, которые связываться не должны. В предлагаемой работе протяженные молекулы аппроксимируются цепочками зарядов. В приближении, когда характерный размер взаимодействующих между собой участков цепочек существенно меньше характерного расстояния между этими участками выведена в общем виде формула для энергии взаимодействия между двумя цепочками, расположенными параллельно друг другу.

На модельных цепочках зарядов показано, что в местах комплементарного расположения зарядов на больших расстояниях между цепочками наблюдается глобальный минимум. Также гипотеза была проверена на цепочках зарядов, полученных проекцией зарядов ДНК на спираль, проходящую по центру большой бороздки, и цепочки, полученной проекцией зарядов белка на отрезок прямой, проходящей вдоль ДНК-связывающего участка (на основе структур специфических комплексов белок-ДНК). В этом случае также показано, что на больших расстояниях функция энергии имеет глобальный минимум в местах наблюдаемого связывания ДНК белком. Разработанный подход представляется применимым для предсказания специфических сайтов связывания на ДНК. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Программы Президиума РАН Молекулярная и клеточная биология и РФФИ (проекты №12-04-01776-а и №12-04-90051-Бел_а).

Литература

1. *Намиот В.А.*, Дальнедействующие взаимодействия между макромолекулами в упорядоченных средах. -Докт. дисс., Москва, 1984.
2. *Намиот В.А., Батяновский А.В. и др.* / Биофизика, 2011, Т.56, вып.4, с.594-601.
3. *Namiot V.A., Balyanovskii A.V. et al.* / Physics Letters A, 2011, V.375, pp.2911–2915.