

АНАЛИЗ СВЯЗЫВАНИЯ ЛИГАНДОВ С НУКЛЕИНОВЫМИ КИСЛОТАМИ (МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ)

Нечипуренко Ю.Д.

Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, Россия, 119991 Москва,
ул. Вавилова, 32, nech99@mail.ru

В докладе суммируются результаты более шестидесяти работ автора, основной корпус которых пошёл в книгу, посвященную математическому моделированию связывания лигандов с ДНК. Продемонстрированы возможности статистической термодинамики для анализа связывания лигандов (белков и антибиотиков) с ДНК и РНК. Обратимое связывание лигандов с нуклеиновыми кислотами рассматривается на основании теории адсорбции. Разработан метод функций распределения, позволяющий наиболее полно описать адсорбционные системы, получены уравнения связывания, показаны пути решения таких уравнений. С единой точки зрения рассмотрена как совокупность моделей адсорбции, так и набор методов анализа экспериментальных данных, проведена классификация моделей адсорбции. Такая классификация позволяет на основании экспериментальных данных восстановить энергетические и геометрические параметры модели адсорбции. Разработанные методы позволяют описать результаты модельных экспериментов по связыванию биологически активных соединений с ДНК в растворе и пролить свет на природу механизмов, лежащих в основе связывания белков с нуклеиновыми кислотами в живой клетке. В книге представлен широкий спектр математических моделей, описывающих связывание лигандов с ДНК и не вошедших ещё в монографии и руководства по молекулярной биофизике.

Литература.

1. Нечипуренко Ю.Д. Анализ связывания биологически активных соединений с нуклеиновыми кислотами. Ижевск, ИКИ, 2015. ISBN 978-5-4344-0295-8
<http://shop.rcd.ru/catalog/385/18492/>