

## МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ФЕРСТЕРОВСКОГО РЕЗОНАНСНОГО ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ

Кристовский Н.В., Армеев Г.А.

г. Москва, ГСП-1, Ленинские горы МГУ 1, стр. 73,

Фёрстеровский резонансный перенос энергии (ФРПЭ) на протяжении нескольких десятилетий успешно применяется для измерения конформационной подвижности и межмолекулярного расстояния биомолекул. В основе метода ФРПЭ лежит расчет эффективности переноса энергии между донорно-акцепторной парой флуорофоров. Флуорофоры состоят из флуоресцентной метки и “линкера”, необходимого для введения флуорофора в структуру биомолекулы. Структуры “линкеров” могут различаться по длине и составу, в зависимости от производителей. Применение различных «линкеров» к одной донорно-акцепторной паре приводит к возможности расхождения данных для одной и той же исследуемой системы. Такие факторы, как структура исследуемого объекта, строение «линкеров», ионная сила раствора, могут влиять на значения эффективности ФРПЭ. Для предварительной оценки эффективности ФРПЭ существует несколько подходов к оценке подвижности флуорофоров, основанных на различных принципах расчета позиционирования меток и требующие различное количество вычислительных ресурсов.

Целью работы является сравнение методов моделирования эффективности Ферстеровского резонансного переноса энергии.

В нашей работе в качестве донорно-акцепторной пары были взяты метки цианиновый 3 и цианиновый 5 (Cy3 и Cy5). Данная донорно-акцепторная пара активно применяется при исследовании хроматина путем введения в структуру ДНК, а также коммерчески доступна, и подходит под типовые спектральные линии лазеров. Для введения флуоресцентных меток в медиальные позиции на ДНК были выбраны “линкеры” представляемые на российском рынке компаниями Syntol и Lumiprobe. Для моделирования подвижности флуоресцентных меток мы применяли 3 подхода: расчет доступного объема (ДО), расчет пространства конформеров и его моделирование в комплексе с ДНК, молекулярная динамика флуорофоров в комплексе с ДНК. Для расчета траекторий молекулярной динамики необходимо подготовить файлы топологии. Для этого мы использовали программную библиотеку ACSYPER, которая представляет собой сценарий-оболочку для программного обеспечения ANTECHAMBER, который упрощает создание топологий и параметров малых молекул для различных программ молекулярной динамики. В нашей работе мы используем свободное программное обеспечение для возможности повторения проведенных исследований. По этой причине, для расчетов парциальных зарядов мы использовали программный пакет PsiRESP. Нами были выбраны позиции введения флуоресцентных меток в ДНК, для выбранных позиций введения флуорофоров были рассчитаны значения эффективности ФРПЭ. Полученные для различных методов моделирования значения эффективности ФРПЭ сравнивались между собой и теоретическими значениями эффективности ФРПЭ.