

УТОЧНЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДВУХЦЕПОЧНОЙ ДНК

Якушевич Л.В.¹, Краснобаева Л.А.^{2,3}

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

²ГБОУ ВПО Сибирский государственный медицинский университет,
Россия, 634050, г. Томск, Московский тракт, 2

³ГБОУ 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.