

**МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
НУКЛЕОТИДОВ ДНК, УГЛЕРОДНОЙ НАНОСТРУКТУРЫ СЕНСОРА
СЕКВЕНАТОРА И КОМПОНЕНТОВ БУФЕРНОГО РАСТВОРА, В ПРОЦЕССЕ
ОДНОМОЛЕКУЛЯРНОГО ДНК-СЕКВЕНИРОВАНИЯ**

Захаров А.А., Пластун И.Л.

Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю. А.
wolfserk@mail.ru inna_pls@mail.ru

Целью данной работы является анализ путем численного моделирования уровня взаимодействия нуклеотидов ДНК с элементами буферного раствора и с сенсором секвенатора (поверхность которого обогащена малеимидом) при одномолекулярном ДНК-секвенировании.

Молекулярное моделирование производилось при помощи программных комплексов Gaussian 09 и DFTB+, основанных на теории функционала плотности (DFT).

В процессе секвенирования можно установить последовательность нуклеотидов в молекуле ДНК при помощи различных методик, в частности исследуется процедура одномолекулярного секвенирования в реальном времени. Идея метода состоит в определении последовательности ДНК за счет наблюдения за работой единичной молекулы ДНК-полимеразы в реальном времени.

В данной методике нуклеотиды ДНК осаждаются на специальную подложку, покрытую алканом, обогащённым малеимидом.

В ходе работы были рассчитаны и проанализированы карты распределения заряда, спектры и структуры взаимодействующих элементов при секвенировании.

В результате анализа были сделаны рекомендации по подбору оптимальных условий для увеличения качества одномолекулярного секвенирования.