

ЛОКАЛИЗАЦИЯ ПРОТОНА В ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЯХ МЕЖДУ ПАРАМИ НУКЛЕИНОВЫХ ОСНОВАНИЙ

Глушенков А.Н., Комаров В.М., Гриневич А.А.

1. Физико-технический институт Крымского федерального университета им.В.И. Вернадского, Россия, 295007, г. Симферополь, просп. Академика Вернадского, 4 2. Институт биофизики клетки РАН, Россия, 142290, г.Пушино, ул. Институтская, 3

Практическое достижение разрешений, позволяющих создавать точные атомные модели, связано с большими сложностями. Этот факт отражен в доле опубликованных в PDB структур с разрешением $\leq 1.2\text{\AA}$ (менее 3%). Следствием является дискуссионный характер положения протона в водородных связях А-Н..В в парах нуклеотидных оснований. Ниже предлагается способ приближённой локализации протона по известным значениям расстояния d_{AB} между атомами А, В. Положение протона на плоскости, образуемой атомами А, Н, В, будет определяться как пересечение дуг окружностей с радиусами равными значениям расстояний d_{AH} , d_{HB} . Длины $d_{AH}(d_{AB})$, $d_{HB}(d_{AB})$ были определены для каждого типа водородной связи с помощью полиномиальной регрессии (1), (2) из данных биофизических свойств пар нуклеотидных оснований опубликованных в [1, 2]. RMSE указаны в Ангстремах. Для СНН/СНО связей регрессию не удалось построить из-за сильной нелинейной зависимости $d_{AH}(d_{AB})$.

$$d_{AH}(d_{AB}) = \begin{cases} NHN : 0.03448283 \cdot d_{AB}^2 - 0.07132499 \cdot d_{AB} + 1.024524; RMSE : 1.12 \\ NHO : 0.01265157 \cdot d_{AB}^2 - 0.03132298 \cdot d_{AB} + 1.01794; RMSE : 0.97 \\ OHN : -0.04814943 \cdot d_{AB} + 1.00225; RMSE : 0.79 \\ OHO : -0.05232821 \cdot d_{AB} + 0.9954081; RMSE : 0.70 \end{cases} \quad (1)$$

$$d_{HB}(d_{AB}) = \begin{cases} NHN : 1.800311 \cdot d_{AB} + 2.110315; RMSE : 0.07 \\ NHO : 0.7217846 \cdot d_{AB} + 1.977629; RMSE : 0.04 \\ OHN : 0.3236109 \cdot d_{AB} + 1.788; RMSE : 0.04 \\ OHO : 0.2828863 \cdot d_{AB} + 1.691251; RMSE : 0.01 \end{cases} \quad (2)$$

Литература.

1. A.N. Glushenkov, D.N. Hovorun. Complete family of H-bonded heteroassociates m9Gua·m1Cyt: quantum-mechanical study// *Bull. of T. Sh. Nat. Univ. of Kyiv: Series Phys. & Math.* **4**, 2014. Стр 253-258 (in Ukrainian).
2. A.N. Glushenkov, D.N. Hovorun. Complete set of H-bonded homoassociates of 9-methylguanine with participation of mutagenic tautomers: quantum-mechanical study// *Rep. of the Nat. Acad. of Sci. of Ukr.* **3**, 2016. Стр 98-106 (in Ukrainian).