

УДК 530.1

**С.А.МЕНДЕЛЕЕВ (6 КУРС, КАФ. ФМИКТМ),  
З.М.ФРЕНКЕЛЬ (АСП., КАФ. ФМИКТМ),  
А.И.МЕЛЬКЕР, Д.Ф.-М.Н., ПРОФ.**

### **ИЗУЧЕНИЕ САМООРГАНИЗАЦИИ НУКЛЕИНОВЫХ КИСЛОТ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

Пространственная организация нуклеиновых кислот является одним из ключевых факторов, определяющих их биологическую функцию в клетке. Для понимания того, как происходит формирование и поддержание этой структуры, в нашей группе было проведено моделирование на компьютере процесса самоорганизации некоторых молекул ДНК и РНК, включая (фенилаланин)-тРНК, методом молекулярной динамики. Данный метод сводится к тому, что для каждого атома составляется уравнение Ньютона, учитывающее его взаимодействие со всеми другими атомами. Полученная система уравнений решается тем или иным численным методом.

Для построения модели были использованы методы, аналогичные используемым нашей группой для белков [1,2]. Была создана программа, создающая файл с начальным распределением атомов молекулы нуклеиновых кислот данной последовательности и задающая таблицу потенциалов межатомных взаимодействий. Кроме того, программа для анализа структур нуклеиновых кислот, как полученных нами, так и находящихся в различных базах данных структур, полученных с помощью рентгеновского анализа.

Аналогично белкам, мы наблюдали сворачивание исходно вытянутой молекулы в глобулу. На данном этапе, мы использовали только спиральную начальную конформацию.

В качестве параметра сравнения полученных структур, аналогично белкам, оказалось удобно использовать распределение суммы торсионных углов. Подобный анализ выявил наличие в (фенилаланин)-тРНК регулярных структур (соответствующих спирали), отсутствующих в структурах, полученных в процессе моделирования процесса самоорганизации. Данное отличие послужит отправной точкой для дальнейшей коррекции потенциалов в нашей модели.

#### **ЛИТЕРАТУРА:**

1. Frenkel Z. M., Melker A. I. Types of polypeptide self-organization. Molecular dynamics simulations. Proceedings of SPIE. (2001), 4348: 195-206.
2. Frenkel Z. M., Melker A. I. The protein self-organization with helical domains. Proceedings of SPIE. (В печати.)