

Влияние распределения мономеров на пространственную упаковку и температуру структурных переходов олигонуклеотидных комплексов

Научный руководитель – Чертович Александр Викторович

Фатихова Амина Владимировна

Студент (специалист)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Физический факультет, Кафедра физики полимеров и кристаллов, Москва, Россия

E-mail: amina.fatikhova@mail.ru

Морфология и функциональность комплексов нуклеиновых кислот определяется особенностями распределения нуклеотидов вдоль по цепи. Оптимизация термодинамических и структурных параметров олигонуклеотидных комплексов посредством эффективного подбора первичной последовательностью является ключевой задачей для создания функциональных молекулярных систем на основе ДНК.

В данной работе с помощью численных методов статистической механики и крупномасштабного молекулярного моделирования исследованы особенности конформационных переходов одиночных последовательностей нуклеотидных остатков с различным распределением повторяющихся звеньев, а также структурные переходы в комплексах нескольких полностью и частично комплементарных олигонуклеотидов. Были рассмотрены олигомеры с чередующимися нуклеотидами вдоль по цепи, с блочным распределением и стохастические последовательности, в том числе синтезированные в рамках марковского процесса.

Показано, что температура перехода от связанного комплекса к клубкам смещается в сторону меньших значений при уменьшении размера комплементарных блоков повторенных нуклеотидов. Определено, что для стохастических комплементарных цепей ширина переходной области существенно меньше, чем для чередующихся и блочных последовательностей.

Для случая вырожденных структур, при которых последовательности могут образовывать как линейные комплексы, так и псевдоузловые структуры [1] с помощью численных методов оптимизации определена методология контроля над концентрационным распределением типов структур.

Работа поддержана в рамках Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета “Молекулярные технологии живых систем и синтетическая биология” (соглашение №23-Ш04-13).

Источники и литература

- 1) Barth A., Kobbe D., Focke M. DNA–DNA kissing complexes as a new tool for the assembly of DNA nanostructures //Nucleic Acids Research. – 2016. – Т. 44. – №. 4. – С. 1502-1513.