

СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА ОКРЕСТНОСТЕЙ САЙТОВ СВЯЗЫВАНИЯ БЕЛКОВ НА ДНК СПОСОБСТВУЮТ СКОЛЬЖЕНИЮ БЕЛКОВ

Щелкунов М.И., Анашкина А.А., Туманян В.Г.

Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, 119991, г. Москва,
ул. Вавилова, д.32, тел. 8-499-135-1392
E-mail: shelkmike.sc@gmail.com

Значительная часть регуляторных процессов в клетке связана с взаимодействием между белками и ДНК. Их экспериментальное предсказание достаточно сложно, поэтому важным является развитие вычислительных методов, основанных на различных свойствах и особенностях этих взаимодействий.

Известно, что для сокращения времени поиска мишеней и, таким образом, ускорения регуляции, белки используют сочетание трёхмерной диффузии в среде и одномерной диффузии (скольжения) по ДНК. Данная работа посвящена проверке гипотезы о том, что окрестности сайтов являются более легкими для скольжения белков (далее мы называем их «лёгкие» области), чем случайные области генома. Эта особенность может достигаться за счёт определённых структурных свойств ДНК окрестностей сайтов. Эти свойства, в свою очередь, зависят от последовательности ДНК.

Для оценки структурных параметров ДНК были использованы данные Ascona B-DNA Consortium [1]. С их помощью геном *E. coli* был исследован на предмет «лёгких» областей. Показано, что области, соответствующие по своим свойствам предполагаемым «лёгким» областям, действительно существуют и, как правило, находятся около начала оперонов. По-видимому, наиболее характерным свойством таких областей является оптимизация по структурному параметру, определяющему растяжение-сжатие ДНК вдоль оси, и его гибкости. Вероятно, этот параметр является ключевым для скольжения самой РНК-полимеразы, движущейся по ДНК в поисках промотора. Идентификация и анализ подобных «лёгких» областей помогает находить промоторы и, в перспективе, может помочь в определении сайтов связывания транскрипционных факторов.

Литература.

1. *Lavery R. et al.* A systematic molecular dynamics study of nearest-neighbor effects on base pair and base pair step conformations and fluctuations in B-DNA. *Nucleic Acids Res.* 38(1); 2010 Jan; 299-313.