

ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЙ ПРОФИЛЬ БАКТЕРИАЛЬНОГО ПРОМОТОРА: ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ И ИОННОЙ СИЛЫ.

Сорокин А.А., Дজেядин Т.Р., Камзолова С.Г.

Институт Биофизики Клетки РАН, Россия, 142290, Пущино, Институтская ул. 3, Тел.:
(4967)739165, E-mail: lptolik@gmail.com

Электростатические силы являются самыми дальнедействующими среди участвующих в межмолекулярных взаимодействиях. Особенную роль они играют при взаимодействии белков с ДНК, поскольку в растворе молекула ДНК несет два неспаренных электрона на каждые 3.6А, являясь одним из самых сильнозаряженных полимеров. Особую роль электростатических взаимодействий в ДНК-белковом узнавании продемонстрировал эффект «молекулярной мимикрии» [1], когда фаговый белок блокирует бактериальную систему рестрикции имитируя распределение заряженных групп, характерное для двойной спирали ДНК.

В нашей лаборатории был разработан простой кулоновский метод, который позволял быстро вычислять профили электростатического потенциала (ЭП) вокруг полногеномных участков ДНК [2-3]. Однако недостатком этого метода было то, что величины ЭП представлялись в произвольных единицах, что позволяло сравнивать между собой различные участки ДНК, но делало невозможным оценку величины и значимости обнаруженных различий. С помощью программы APBS [4] нами произведено вычисление распределения ЭП вокруг 700 промоторных участков *E. coli* методом решения нелинейного уравнения Пуассона-Больцмана для трех значений температуры и четырех значений ионной силы. Используя полученные распределения был вычислен одномерный профиль ЭП, также как описано в работе [2].

Было показано, что в условиях, для которых строился алгоритм быстрого вычисления профиля электростатического потенциала, положение пиков и провалов на кулоновском и пуассоновском профилях полностью совпадают, при этом величина экстремальных значений на кулоновском профиле ниже примерно на 3-5%. Используя полученные профили построена схема пересчета произвольных величин кулоновского метода в единицы кТ, полученные методом решения уравнения Пуассона-Больцмана.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ совместно с Московской областью в рамках научного проекта **14-44-03679-р_центр_а**.

Литература

1. *Tsonis P.A., Dwivedi B.* Molecular mimicry: structural camouflage of proteins and nucleic acids // *Biochimica et biophysica acta* **1783**, 2, 177–187, 2008
2. *Polozov, R.V., et al.* Electrostatic potentials of DNA. Comparative analysis of promoter and nonpromoter nucleotide sequences // *JBSD* **16**, 6, 1135–1143, 1999
3. *Kamzolova, S.G., Beskaravainy, P.M., Sorokin, A.A.* Electrostatic Properties of Bacteriophage T7 Early Promoters Recognized by *E. coli* RNA Polymerase // *JBSD* **28**, 6, 1121–1122, 2011
4. *Baker NA, Sept D, Joseph S, Holst MJ, McCammon JA.* Electrostatics of nanosystems: application to microtubules and the ribosome // *PNAS* **98**, 10037-10041 2001.