

Моделирование петель хроматина с учетом их физико-химических свойств

Сидоренко Иван Алексеевич

Студент (магистр)

Новосибирский государственный университет, Физический факультет, Новосибирск,
Россия

E-mail: vanyasidorenko22@gmail.com

Информация о трехмерной упаковке хроматина в клеточном ядре необходима для понимания фундаментальных свойств организации и функционирования генома. От пространственной структуры ДНК напрямую зависят такие важные биологические процессы как регуляция экспрессии генов, репликация ДНК и т.д. Пространственная укладка хромосомы в ядре во многом зависит от эпигенетических модификаций гистонов и ДНК.

Цель работы - создание модели петли хроматина с учетом его физико-химических свойств и суперспирализации для изучения особенностей ее упаковки.

Разработана компьютерная модель структуры хроматиновой петли на основе модификации ранее предложенной модели Benedetti [1]. Петля представлена как гетерополимер, мономеры которого находятся в различных эпигенетических состояниях. Суперспирализация ДНК моделируется потенциалом торсионных углов с помощью «фантомных» частиц; также вводится потенциал Леннарда-Джонса для взаимодействий между мономерами и потенциал, зависящий от длин связей между соседними мономерами.

Модель дает возможность имитировать динамику петель хроматина за счет модификации заряда мономера с учетом эффекта суперспирализации ДНК. Разрабатываемая модель может обеспечить основу для понимания того, как регуляция эпигенома в ходе развития может привести к вариациям клеточных фенотипов через масштабную реорганизацию генома.

Источники и литература

- 1) Benedetti, F., Dorier, J., Burnier, Y. and Stasiak, A. (2014) Models that include supercoiling of topological domains reproduce several known features of interphase chromosomes. *Nucleic Acids Res.*, 42, 2848-2855.