

## Крупнозернистая модель комплементарных взаимодействий для ДНК-оригами.

Научный руководитель – Решетников Роман Владимирович

*Шагиев Айдар Халилович*

*Студент (специалист)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Факультет  
биоинженерии и биоинформатики, Москва, Россия

*E-mail: ipodaidar@gmail.com*

Ранее в нашей лаборатории было разработано крупнозернистое силовое поле COSM, предназначенное для оптимизации геометрии и оценки конформационного ландшафта ДНК-оригами [1]. Целью настоящего проекта была реализация комплементарных взаимодействий между цепями ДНК в рамках модели COSM.

Для решения поставленной задачи в модель были добавлены четыре новых частицы, соответствующие нуклеотидам А, Т, G и С. Ковалентные параметры для описания частиц соответствуют физическим свойствам двуспиральных В-ДНК (персистентная длина, торсионная жёсткость, модуль продольной упругости) [2, 3]. Основным фактором, ответственным за специфичность комплементарного распознавания между цепями ДНК в нашей модели, являются нековалентные взаимодействия: электростатические и ван-дер-Ваальсовы. Для подбора параметров нековалентных взаимодействий мы спроектировали три пары взаимно комплементарных олигонуклеотидов длиной 20 оснований с разным содержанием G-C пар. Для этих пар олигонуклеотидов мы получали кривые плавления на детектирующем ПЦР-амплификаторе Bio-Rad CFX96. Далее проводили три последовательных отсеивающих раунда подбора параметров, критериями успешности в которых являлись: (1) сохранение двуцепочечной структуры при экспериментальной температуре отжига; (2) разрушение двойной спирали при экспериментальной температуре плавления; (3) разрушение двойной спирали при взаимодействии некомплементарных цепей.

Для тестирования лидерных параметров мы спроектировали олигомерные системы ДНК-оригами, состоящие из унифицированных протомеров, распознающих друг друга с помощью взаимно комплементарных последовательностей. Самосборку таких систем моделировали в модифицированном поле COSM; в дальнейшем мы планируем экспериментальную проверку расчётных данных с помощью атомной силовой микроскопии.

Результаты данного исследования послужат основой для создания инструмента, позволяющего оценивать эффект температуры и солевого состава на эффективность самосборки ДНК-оригами - проблемы, на настоящий момент не решённой научным сообществом.

### Источники и литература

- 1) Reshetnikov, R., Stolyarova, A., Zalevsky, A., Panteleev, D., Pavlova, G., Klinov, D., Golovin, A. and Protopopova, A. (2017). A coarse-grained model for DNA origami. *Nucleic Acids Research*, 46(3), pp.1102-1112.
- 2) Lipfert, J., Kerssemakers, J., Jager, T. and Dekker, N. (2010). Magnetic torque tweezers: measuring torsional stiffness in DNA and RecA-DNA filaments. *Nature Methods*, 7(12), pp.977-980.

- 3) Smith, S., Cui, Y. and Bustamante, C. (1996). Overstretching B-DNA: The Elastic Response of Individual Double-Stranded and Single-Stranded DNA Molecules. *Science*, 271(5250), pp.795-799.