

# ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОСТАТИКИ В РАЙОНЕ САЙТОВ ПОСАДКИ cAMP-CRP КОМПЛЕКСА НА ГЕНОМНОЙ ДНК *E. coli*

Институт биофизики клетки РАН  
Лаборатория механизмов функционирования клеточного генома

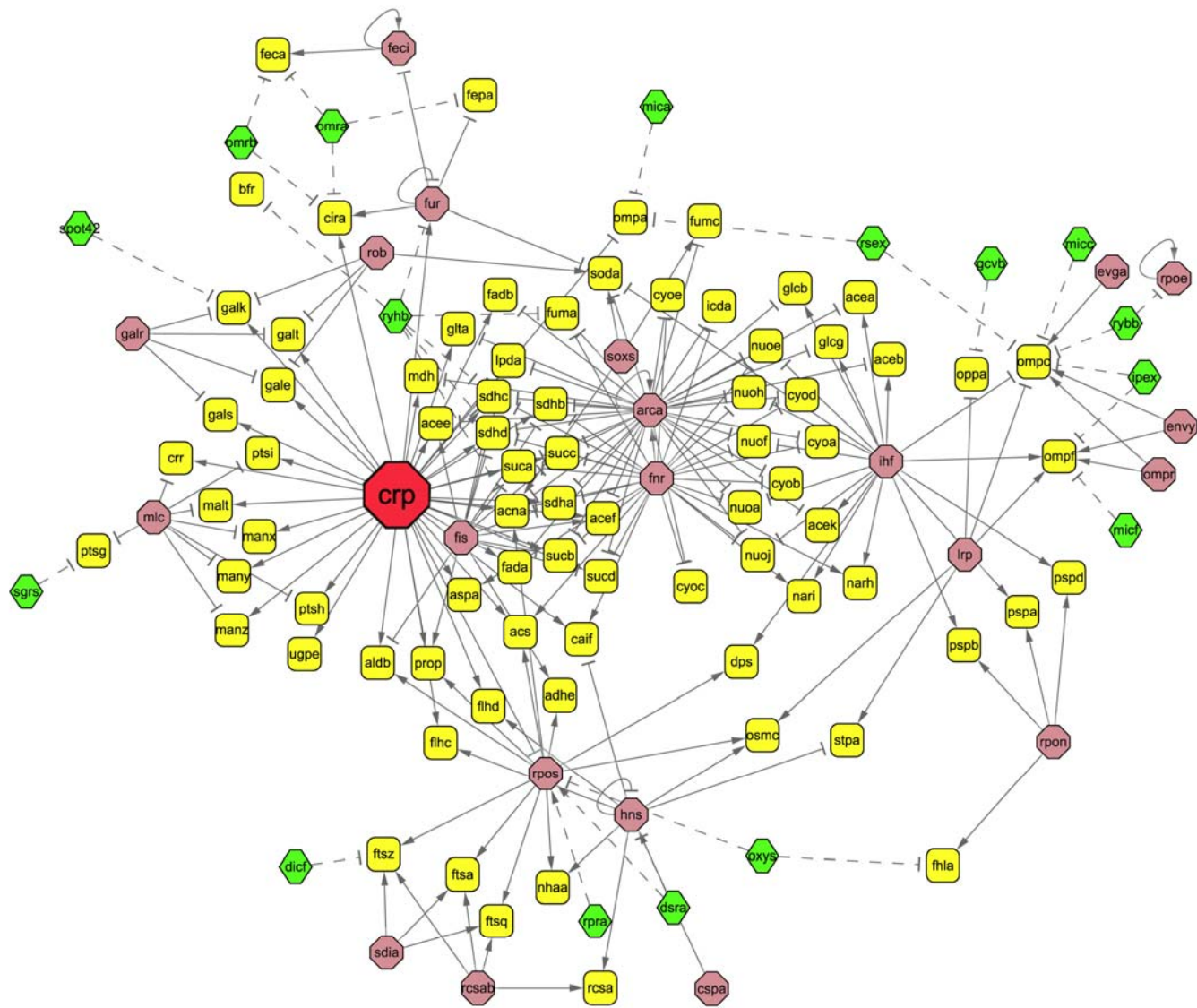
Крутина Е.А.,

Крутинин Г.Г.,  
к.б.н. Осипов А.А.,  
д.б.н. Камзолова С.Г.

## Актуальность и постановка задачи

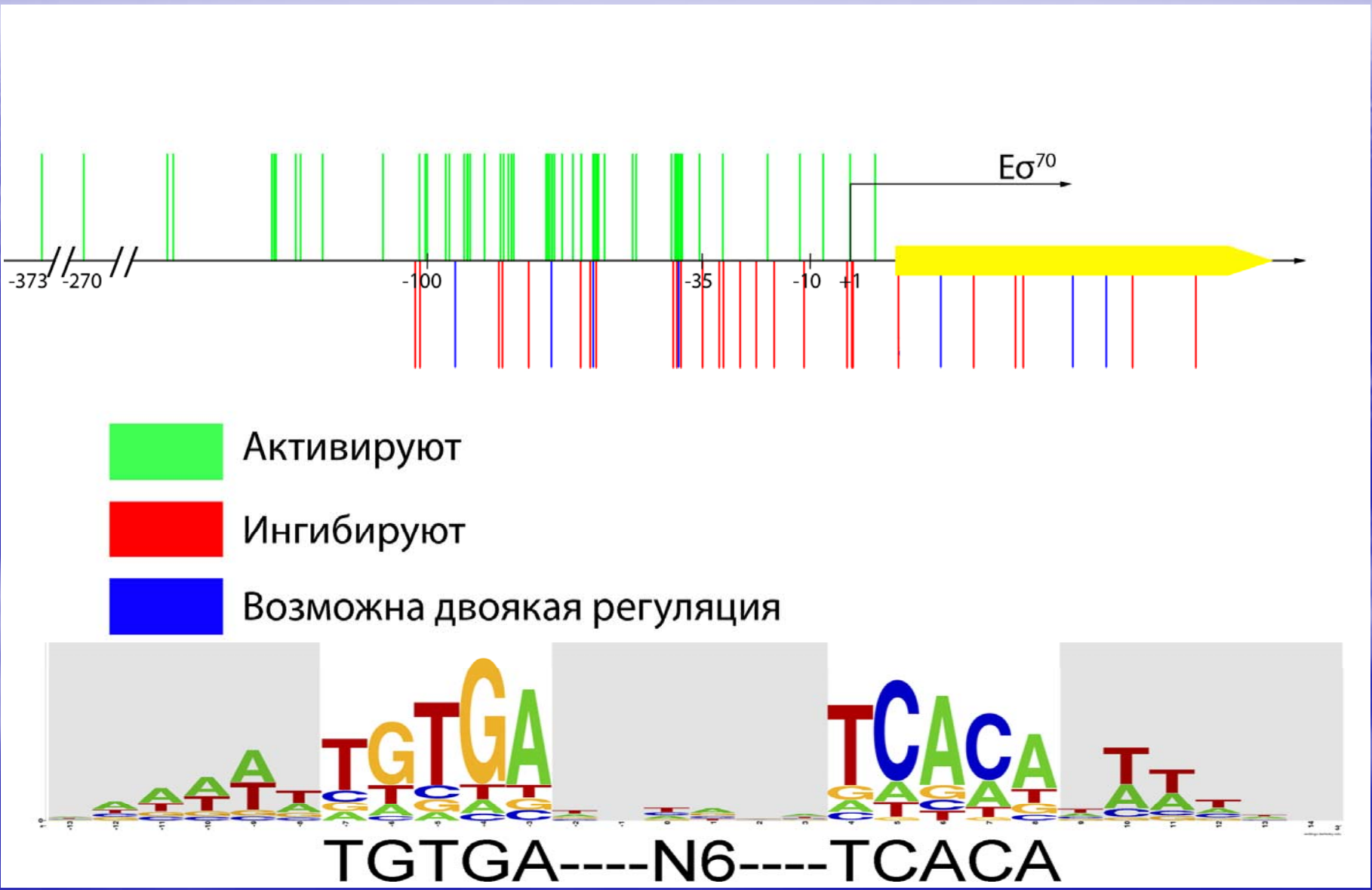
1. Изучение физических свойств ДНК важно для понимания механизмов ДНК-белковых взаимодействий, в частности, для промоторно-полимеразного узнавания на основе их электростатических свойств.
2. Электростатический профиль молекулы ДНК неоднозначно зависит от ее нуклеотидной последовательности, поэтому в дополнение к текстовому анализу необходимо исследовать ее физические особенности.
3. В связи с этим возникает потребность расширить наши представления в отношении белков, взаимодействующих с ДНК.
4. В качестве объекта данного исследования был выбран cAMP-CRP-комплекс, как регулятор многих метаболических процессов в клетке.

## CRP-регуляция метаболизма глюкозы

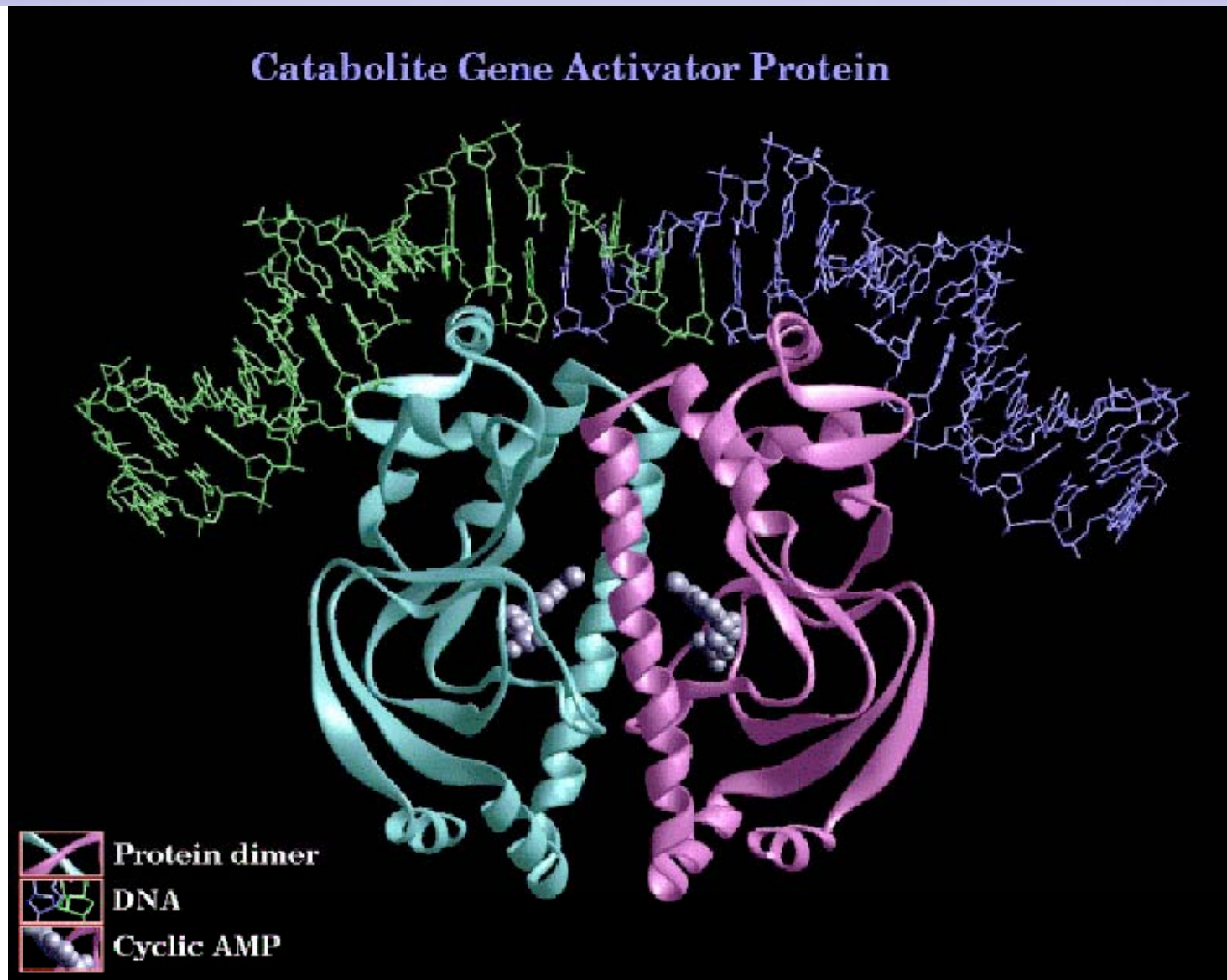


4.

# Расположение центров сайтов посадки CRP относительно промотора



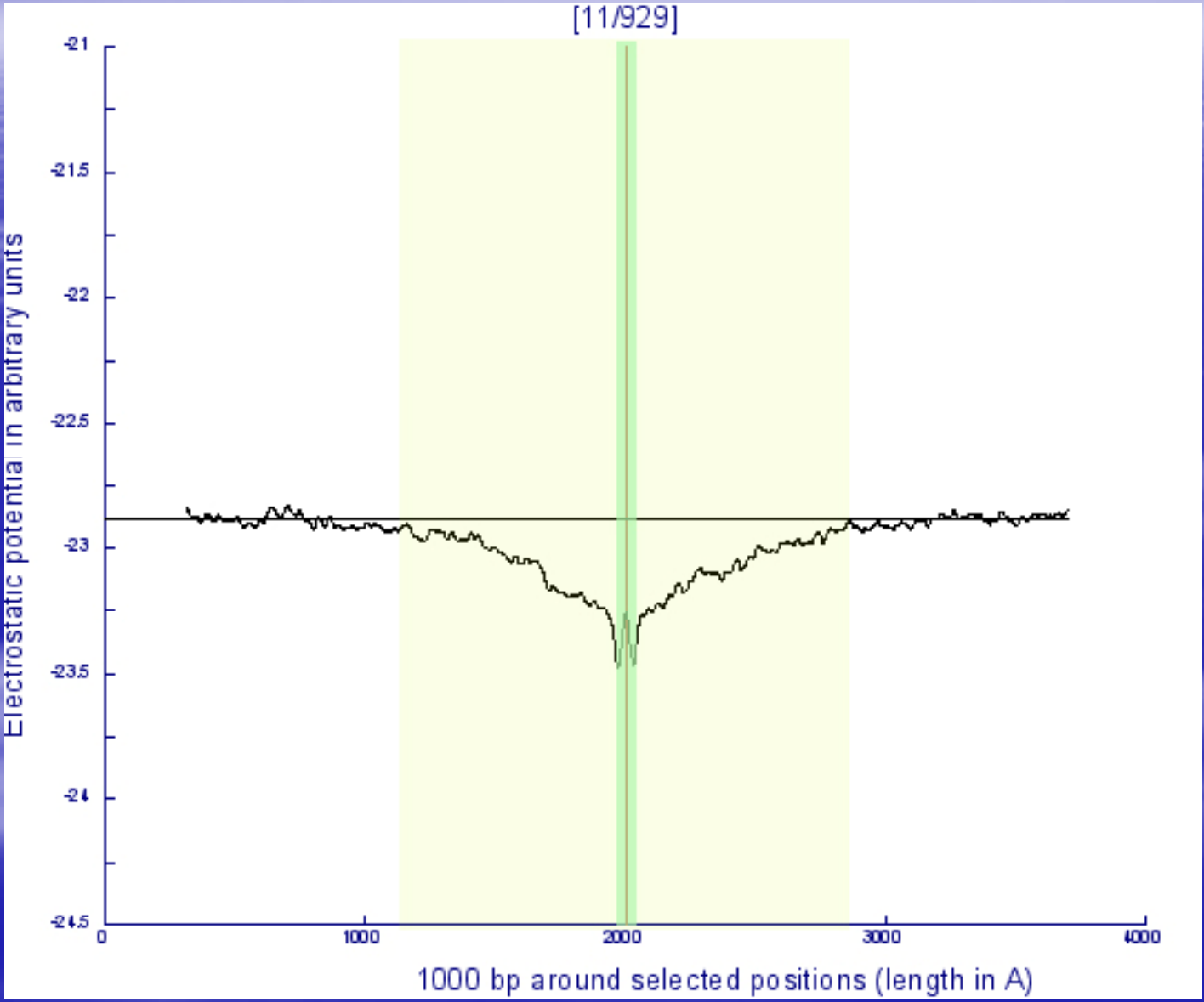
## Структура комплекса сAMP-CRP-DNA





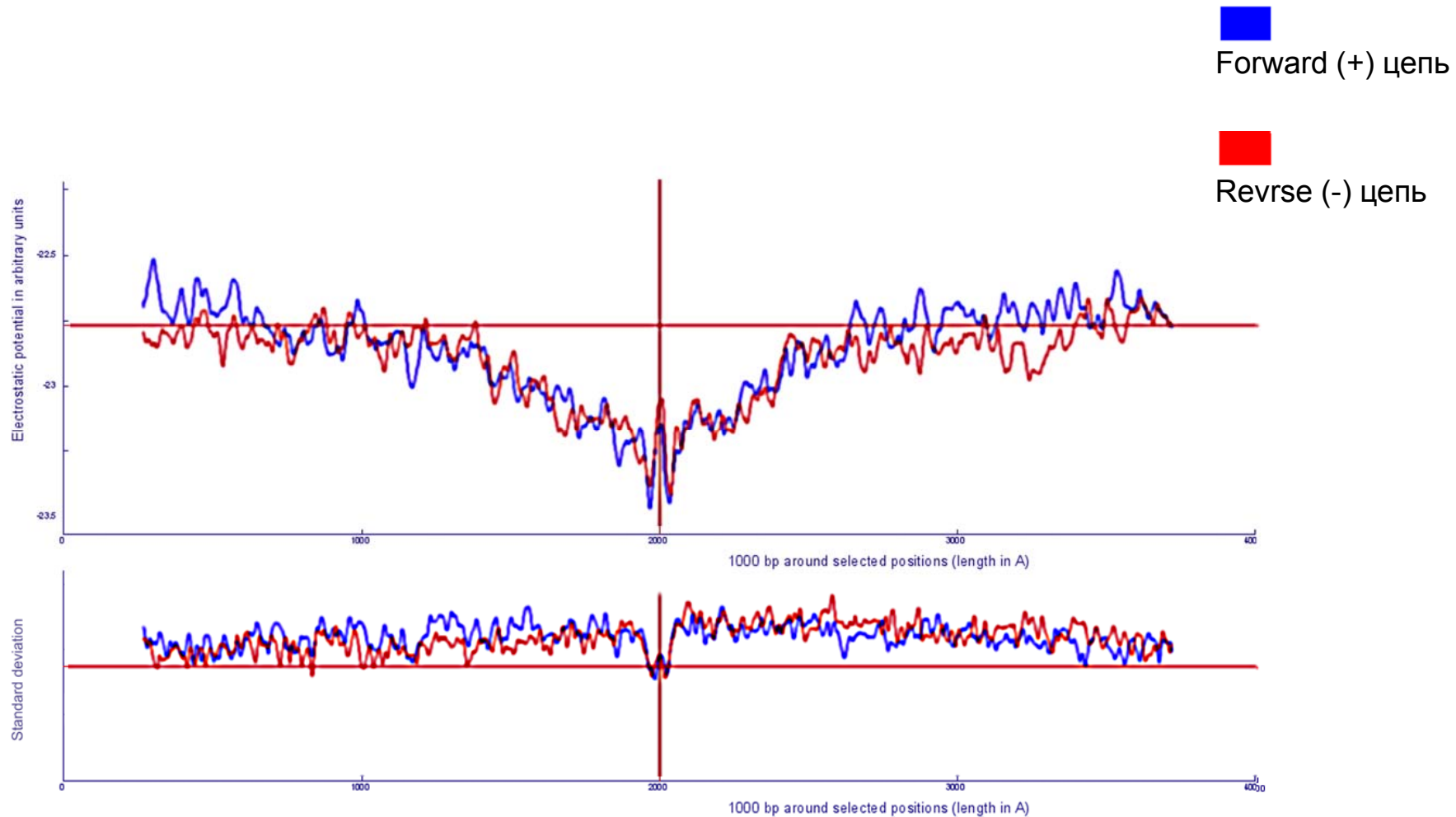
6.

# Электростатический профиль вокруг сайтов посадки CRP



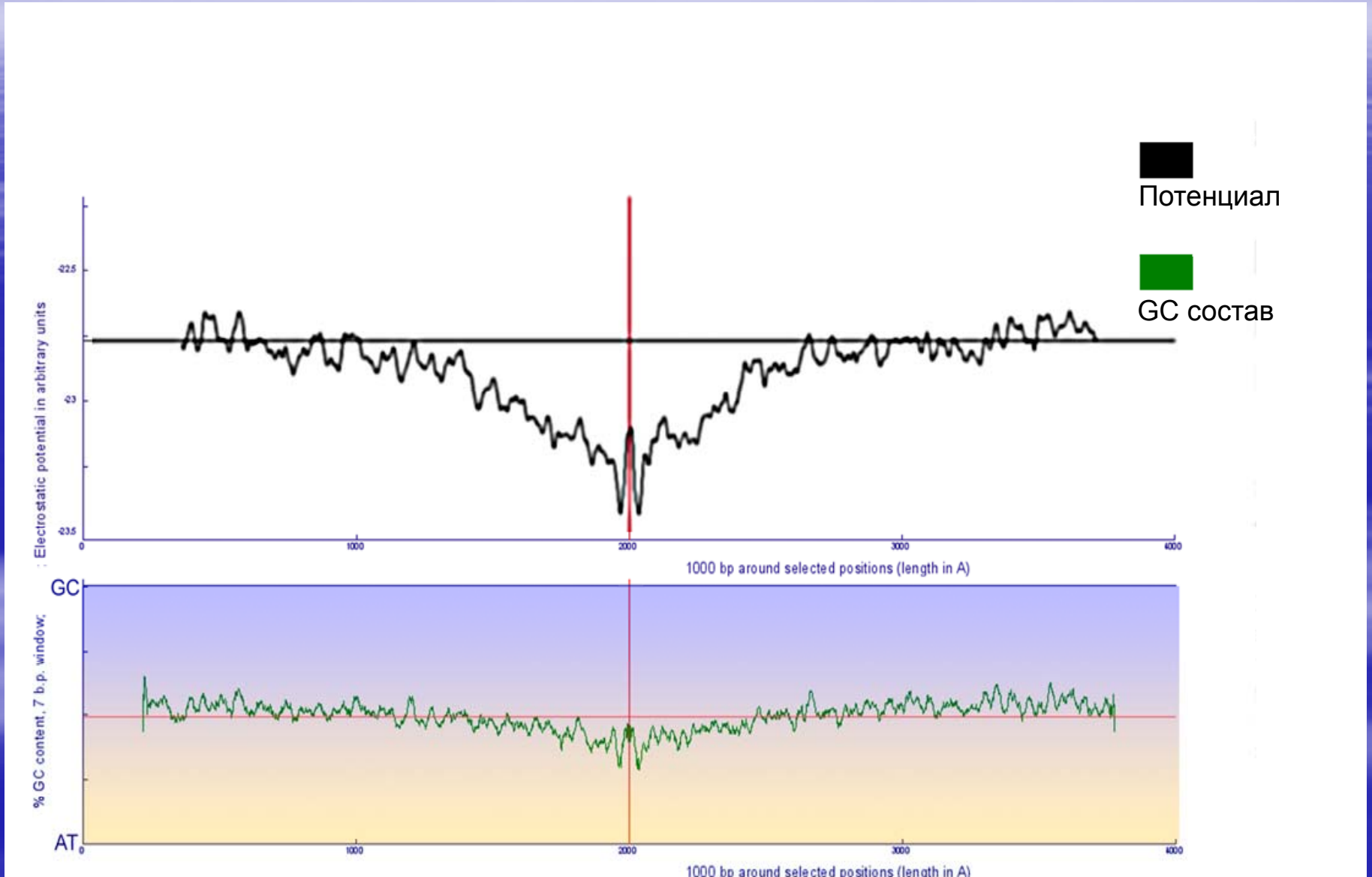
Зеленым цветом выделена область консенсуса, бледно-желтым – локальное увеличение электростатического потенциала.

# Электростатический профиль вокруг сайтов посадки CRP *E.coli*



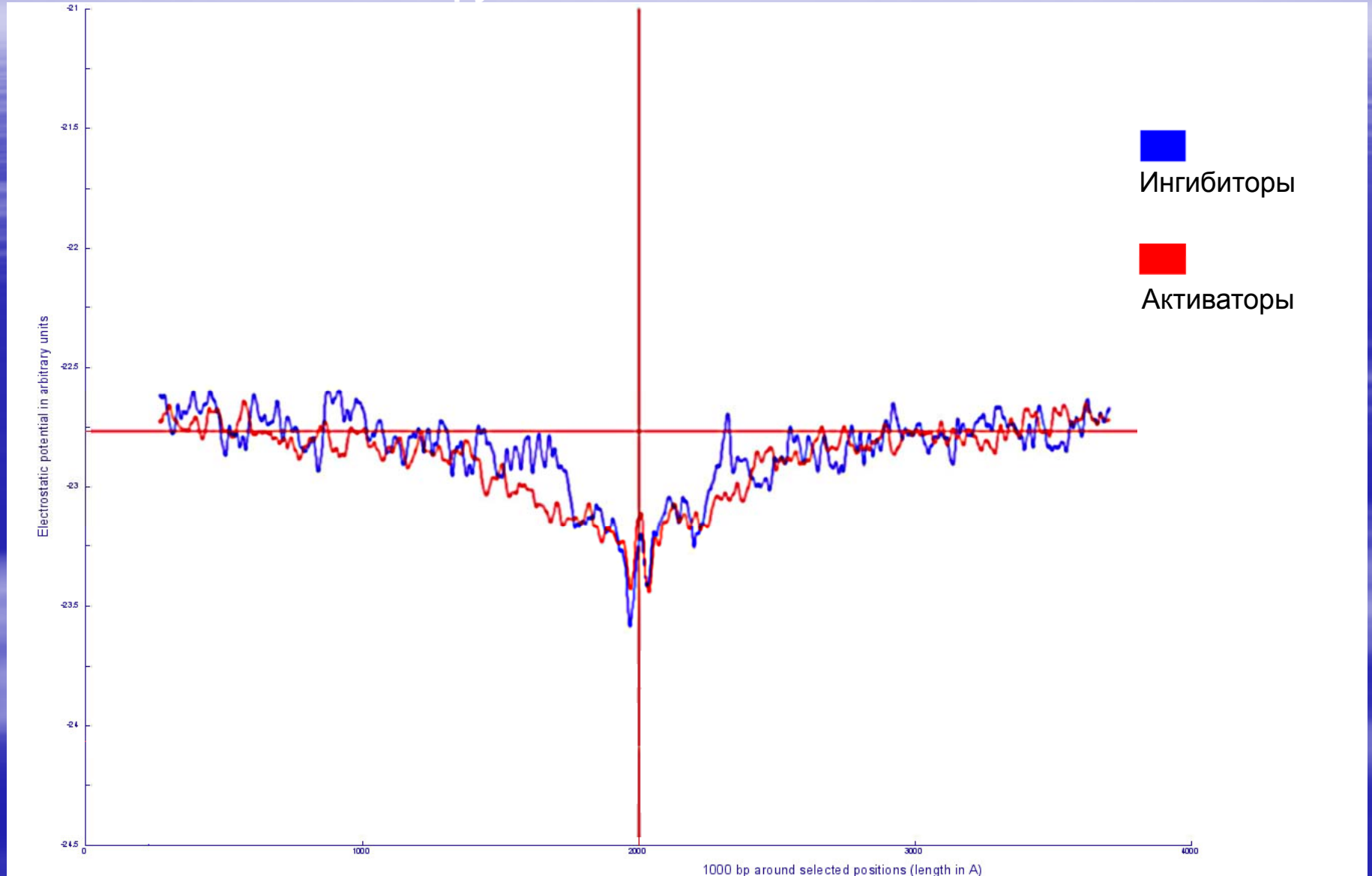
8.

# Электростатический профиль и GC состав вокруг сайтов посадки CRP *E.coli*

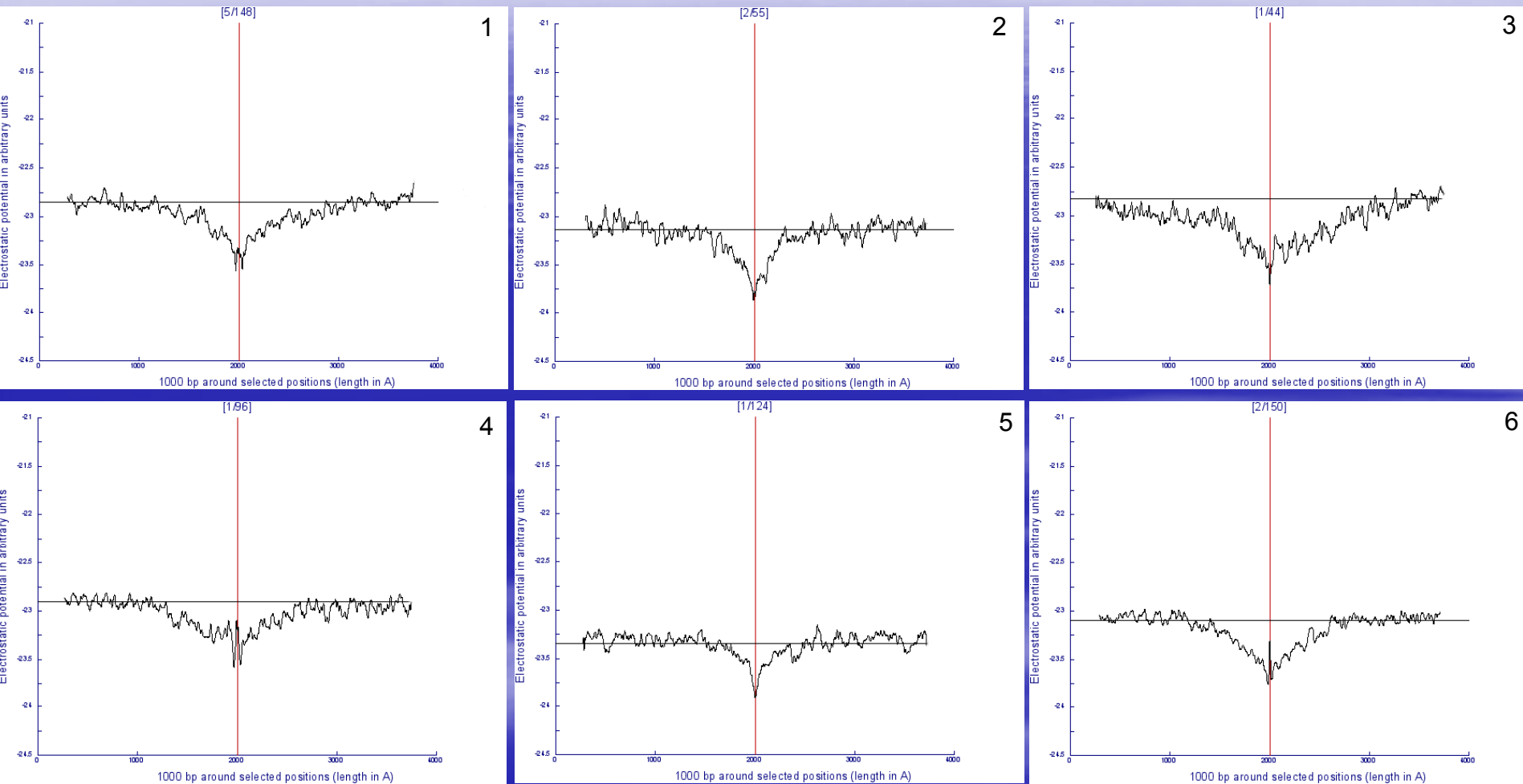




## Электростатический профиль вокруг ингибирующих и активирующих сайтов посадки CRP *E.coli*



# Электростатический профиль в районе сайтов посадки разных факторов транскрипции у разных организмов



1. FUR Shewanellaceae

4. CRP Shewanellaceae

2. CodY Streptococcus

5. CodY Staphylococcus

3. ArgR Shewanellaceae

6. CcpA Streptococcus

# ВЫВОДЫ

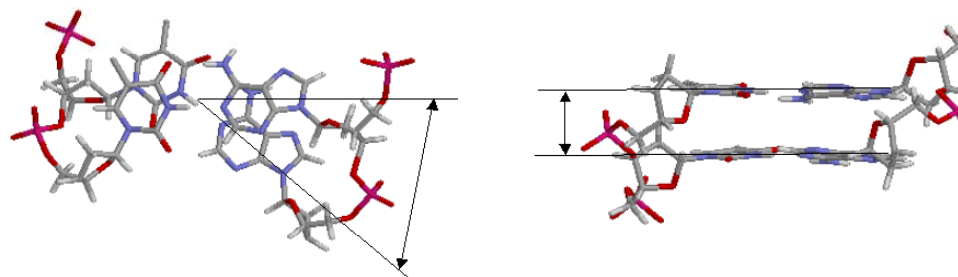
1. Обнаружен характерный W-образный электростатический профиль участка ДНК, содержащего сайт посадки cAMP-CRP и совпадающий с консенсусом.
2. W-образный элемент находится на дне широкой симметричной электростатической ямы, сформированной при участии окружающих нуклеотидных последовательностей на протяжении около 150-300 пар оснований.
3. Эта яма обогащена АТ-парами, что, по-видимому, играет роль не обеспечения легкоплавкости, а формирования независимой от промотора электростатической ловушки.
4. Сайты посадки CRP, которые оказывают активирующее действие, имеют в среднем более широкую окружающую яму, что, по-видимому, связано с наличием сайтов посадки других регуляторных белков.
5. На примере взаимодействия регуляторного белка CRP с его сайтами посадки показан универсальный характер электростатических взаимодействий для ДНК-белкового узнавания, что подтверждается также свойствами сайтов посадки других транскрипционных факторов.

UAA

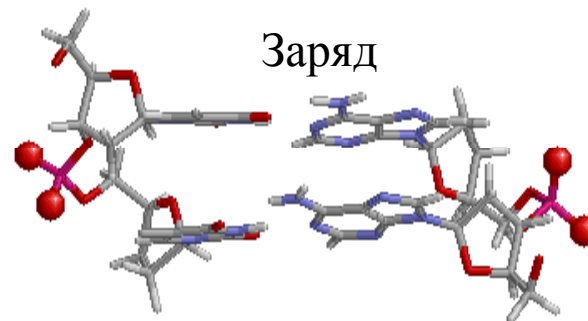
СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!

# Расчет электростатических свойств ДНК

## Геометрия



## Заряд



## Закон Кулона

$$V(\vec{r}) = \sum_i \frac{q_i}{\epsilon(r) |\vec{r} - \vec{r}_i|}$$

$q_i$  — заряд  $i$ -того атома молекулы ДНК;  
 $\vec{r}_i$  — радиус-вектор  $i$ -того атома;  
 $\vec{r}$  — радиус-вектор точки наблюдения;  
 $\epsilon(r)$  — диэлектрическая проницаемость как функция расстояния.

