

© МОРЯЧКОВ Р. В., СПИРИДОНОВА В. А., ЗАБЛУДА В. Н., ПЕТЕРС Г. С., СОКОЛОВ А. Э.

УДК 539.1.06; 62-404.5; 57.088.52

МЕТОД МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ В ПРИМЕНЕНИИ К БИОЛОГИЧЕСКИМ МАКРОМОЛЕКУЛАМ

Р. В. Морячков^{1,2}, В. А. Спиридонова³, В. Н. Заблуда¹, Г. С. Петерс⁴, А. Э. Соколов^{1,2}

¹Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН - ОП ФИЦ КНЦ СО РАН;

²ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет», Красноярск;

³НИИ физико-химической биологии им. А.Н. Белозёрского, МГУ;

⁴НИЦ «Курчатовский институт».

Резюме. В статье представлены возможности метода малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) в области исследования надатомной структуры и физических параметров биологических макромолекул на примере изучения аптамера RE31 с помощью измерений в Курчатовском центре синхротронного излучения и последующего анализа полученных данных, а также моделирования трёхмерной структуры молекулы.

Ключевые слова: SAXS, МУРР, ДНК, аптамер, 3D-структура, конформация.

METHOD OF SMALL-ANGLE X-RAY SCATTERING AS APPLIED TO BIOLOGICAL MACROMOLECULES

R. V. Moryachkov, V. A. Spiridonova, V. N. Zablude,

G. S. Peters, A. E. Sokolov

Abstract. The paper presents the possibility of small-angle X-ray scattering method (SAXS) in the area of study above-atomic structure and physical parameters of biological macromolecules on the example of aptamer RE31 with the help of measuring in the Kurchatov Center of Synchrotron Radiation and subsequent analysis of the obtained data, and modeling of three-dimensional structure of the molecule.

Key words: SAXS, SAXS, DNA aptamer, 3D-structure, conformation.

Метод малоуглового рентгеновского рассеяния показал свою состоятельность при изучении конформации молекулы аптамера на основе ДНК RE31 (GTGACGTAGGTTGGTGTGGTTGGG GCGTCAC) [1]. Вся обработка данных измерений проводилась в пакете программ ATSAS [2]. В программе GNOM определены радиус инерции $R_g \approx 1,64$ нм, максимальный размер частицы $D_{\max} = 4,5$ нм, составлена функция распределения

по расстояниям $p(r)$, в программе DAMMIN [3] была получена трёхмерная модель общей электронной оболочки молекулы [4].

Представленные результаты исследований показывают, что можно наблюдать и динамику изменения конформации молекул в растворе в зависимости от температуры. На рисунке 1 представлены графики кривых рассеяния на RE31 и графики Кратки [5] при различных значениях

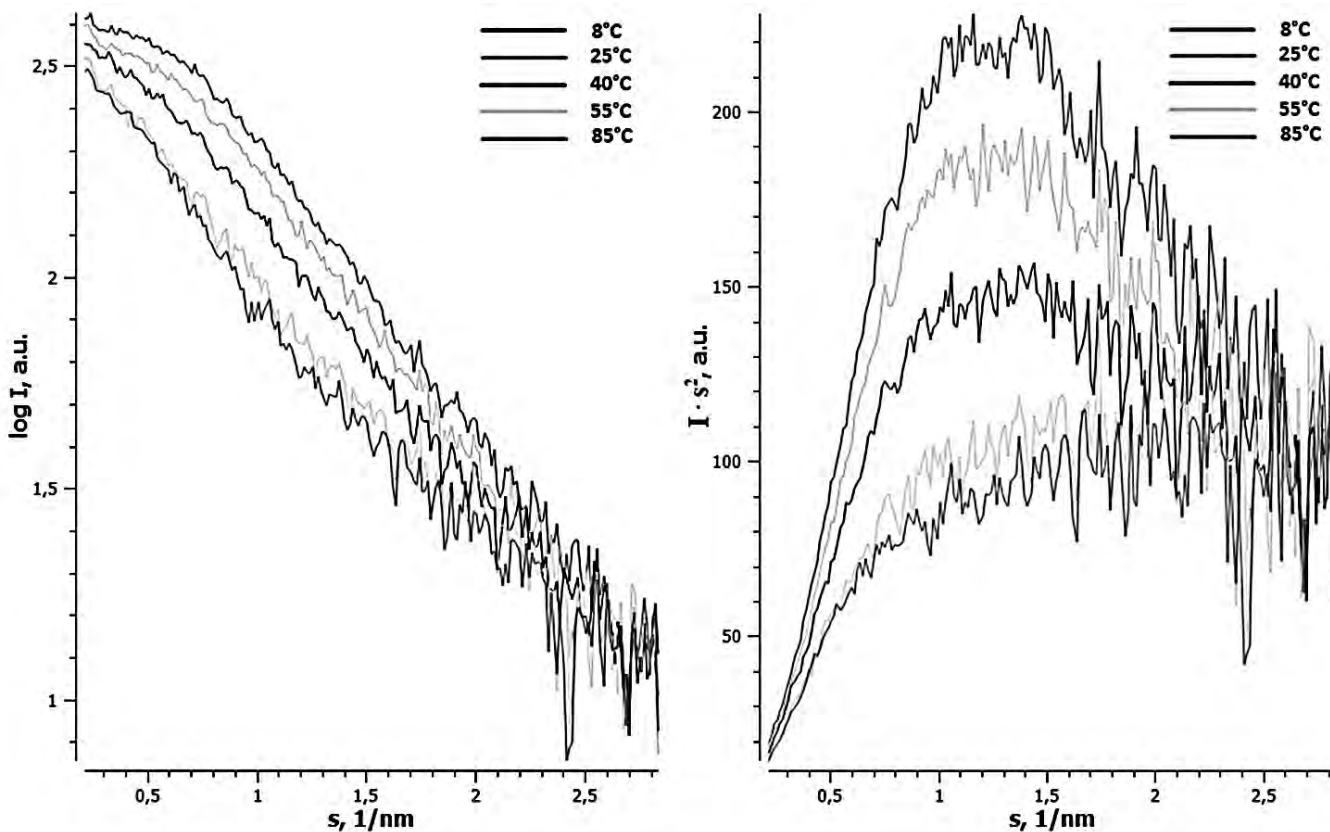


Рис. 1. Кривые МУРР на аптамере RE31 (слева) и график Кратки по данным МУРР (справа) при различных температурах.

температуры, от 8°C до 85°C. Из графика МУРР видно, что кривая рассеяния при повышении температуры проседает на значениях 0,2-2,2 нм⁻¹, что говорит о появлении в растворе молекул с различной конформацией, то есть увеличение подвижности молекул аптамеров и за счёт этого полидисперсности. Те же выводы подтверждает и график Кратки, где хорошо заметен переход от компактной структуры к развёрнутой при нагреве [5].

Литература

1. Krauss I. R. et al. Different duplex/quadruplex junctions determine the properties of anti-thrombin aptamers with mixed folding // *Nucleic acids research*. – 2015. – С. gkv1384.
2. Petoukhov M. V. et al. New developments in the ATSAS program package for small-angle scattering data analysis // *Journal of applied crystallography*. – 2012. – Vol. 45, № 2. – P. 342-350.
3. Svergun D. I. Restoring low resolution structure of biological macromolecules from solution scattering using simulated annealing // *Biophysical journal*. – 1999. – Vol. 76, № 6. – P. 2879-2886.
4. Moryachkov R.V., Spiridonova V.A. et al. Small angle X-ray scattering on RE31 aptamer // VI Euro-Asian Symposium «Trends in MAGnetism» (EASTMAG-2016) : abstracts. – 2016. – Ст. P12.3. – P. 559-560.
5. Doniach S. Changes in biomolecular conformation seen by small angle X-ray scattering // *Chemical Reviews*. – 2001. – Vol. 101, № 6. – С. 1763-1778.