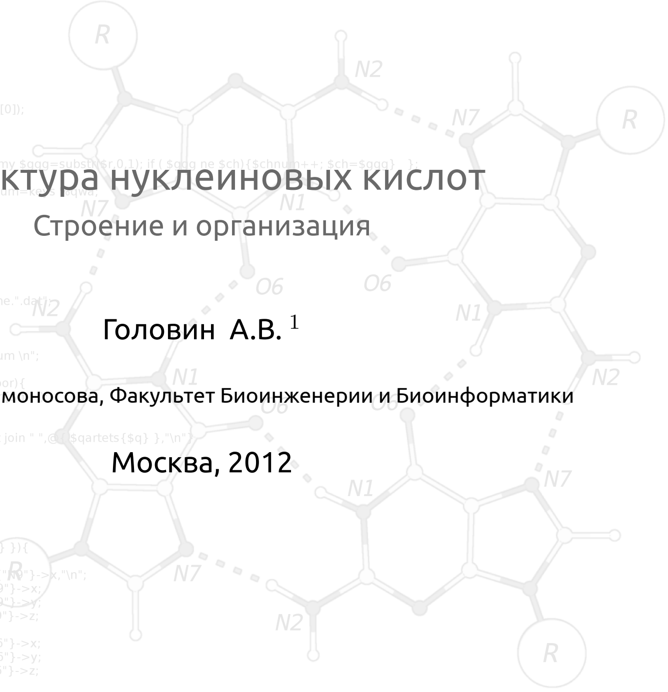


Структура нуклеиновых кислот

Строение и организация

Головин А.В. [1]

[1] МГУ им М.В. Ломоносова, Факультет Биоинженерии и Биоинформатики

Москва, 2012

```
#!/usr/bin/perl
use Math::VectorReal qw( :all );
use Math::Trig ;
use strict;



#(my %coor,my $chnum)=read_pdb($ARGV[0]);
my %coor=read_pdb($ARGV[0]);
my $dir=$ARGV[1];
my $ch, my $chnum;
foreach my $r ( sort keys %{$coor{"0"}}){ my $ggg=substr($r,0,1); if ( $ggg ne $ch){$chnum++; $ch=$ggg}   };

my %qwa=find_quart( $coor{"0"} ); my $qnum=keys %qwa;


if ($qnum >0){
#system("mkdir $ARGV[1]");
my $filename=$ARGV[0];
$filename=~ s/^.*\///;
$filename=~ s/\.pdb//;
#$filename=$chnum."_".$qnum."/".$filename.".dat";
$filename="$dir/".$filename.".dat";
print  "$filename\n";
open OUT,">$filename";
print OUT "#INFO  chain $chnum qnum $qnum \n";

  foreach my $m (sort {$a<=>$b} keys %coor){
    my  %qartets=
    my  %q= find_q( $coor{$m} );

#       foreach my $q ( keys  %qartets){ print join " ",@{ $qartets{$q} },"\n"};

        foreach my $q ( keys  %qartets){

          my $nx; my $ny; my $nz;
          my $ox; my $oy; my $oz;
             my $r;

          foreach my $res     ( @{ $qartets{$q} })){

#                         print "$q $coor{$m}{$res}{"N9"}->x,"\n";
               $nx=$nx+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->x;
               $ny=$ny+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->y;
               $nz=$nz+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->z;

               $ox=$ox+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->x;
               $oy=$oy+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->y;
               $oz=$oz+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->z;
               $r=$res;
             }
```

Содержание:

- Введение
- Химическое строение НК
- 3D Структура ДНК
- Структура РНК
- Вторичная структура РНК

Нуклеиновые кислоты.

Нуклеиновые кислоты (НК) – это высокомолекулярные линейные полярные биополимеры, **полинуклеотиды**, которые построены из **нуклеотидных остатков.**

2 типа нуклеиновых кислот:

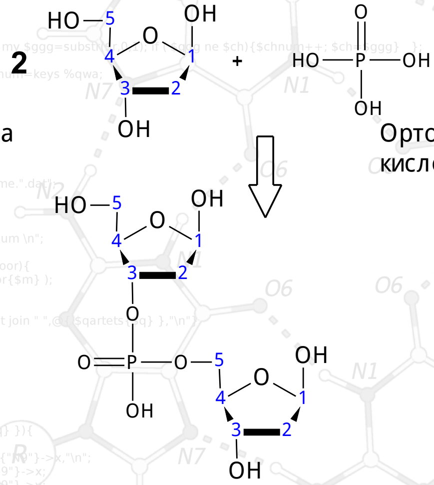
- дезоксирибонуклеиновая кислота – ДНК
- рибонуклеиновая кислота – РНК

ДНК

Расшифровка аббревиатуры ДНК:

- Д**Н**К – открытие и выделение **"нуклеина"** из ядер (нуклеус) лейкоцитов Ф. Мишером 1869 г.
- ДН**К** – линейный сополимер на основе ортофосфорной **кислоты**.
- **Д**НК – линейный сополимер ортофосфорной кислоты и **дезоксирибозы**

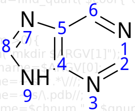
Дезоксирибоза и ортофосфорная кислота



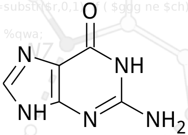
Дезоксирибоза

Ортофосфорная кислота

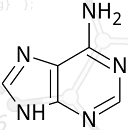
Основания



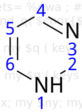
Purine



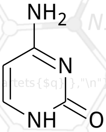
Guanine



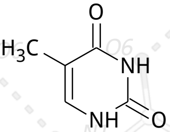
Adenine



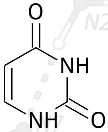
Pyrimidin



Cytosine

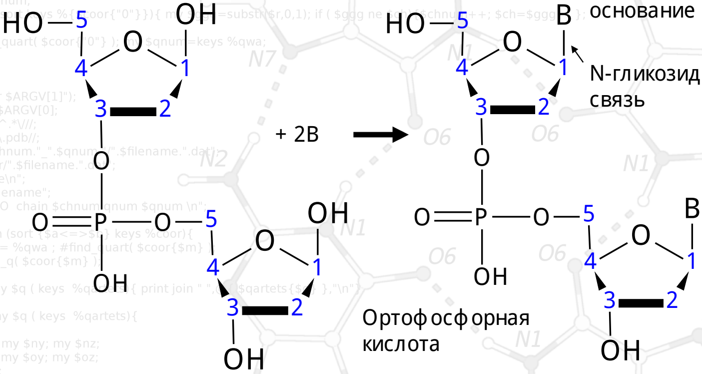


Thymine



Uracil

Основания и остов



основание

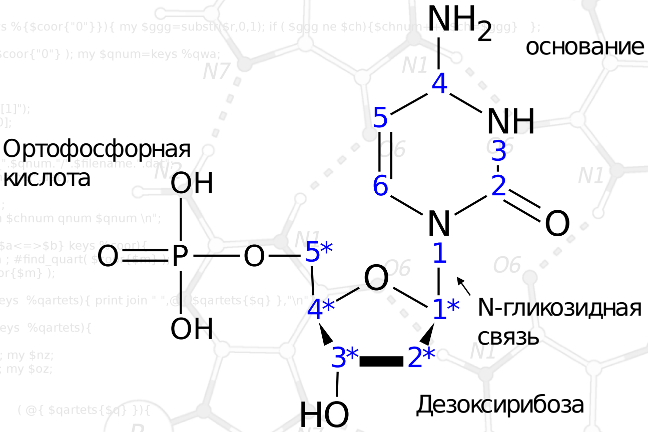
N-гликозидная связь

Ортофосфорная кислота

Дезоксирибоза

#!/usr/bin/perl
use Math::VectorReal qw(:all);
#(my %coor,my $chnum)=read_pdb($ARGV[0]);
my %coor=read_pdb($ARGV[0]);
my $dir=$ARGV[1];
my $ch, my $chnum;
foreach my $r (sort keys %{$coor{"0"}}){ my $ggg=substr($r,0,1); if ($ggg ne $ch){ $chnum++; $ch=$ggg;} };
my %qwa=find_quart($coor{"0"}); my $qnum=keys %qwa;
if ($qnum >0){
#system("mkdir $ARGV[1]");
my $filename=$ARGV[0];
$filename=~ s/^.*\///;
$filename=~ s/\.pdb//;
#$filename=$chnum."_".$qnum."_".$filename.".dat";
$filename="$dir/".$filename.".dat";
print "$filename\n";
open OUT,">$filename";
print OUT "#INFO chain $chnum qnum $qnum \n";
foreach my $m (sort {$a<=>$b} keys %coor){
my %qartets= %qwa ; #find_quart($coor{$m});
my %q= find_q($coor{$m});
# foreach my $q (keys %qartets){ print join " ",(@{ $qartets{$q} },"\n")}
foreach my $q (keys %qartets){
my $nx; my $ny; my $nz;
my $ox; my $oy; my $oz;
my $r;
foreach my $res (@{ $qartets{$q} }){
# print "$q $coor{$m}{$res}{"N9"}->x,"\n";
$nx=$nx+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->x;
$ny=$ny+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->y;
$nz=$nz+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->z;
$ox=$ox+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->x;
$oy=$oy+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->y;
$oz=$oz+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->z;

Нуклеотид ДНК



Ортофосфорная кислота

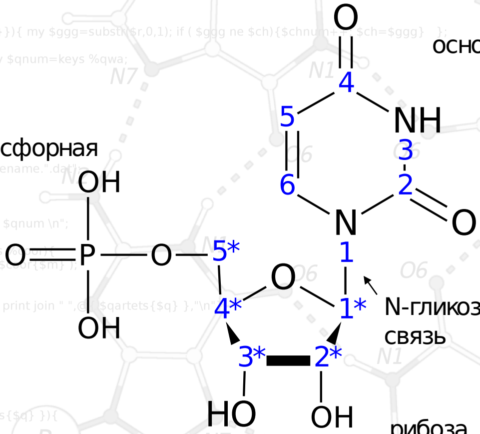
основание

N-гликозидная связь

Дезоксирибоза

```
#!/usr/bin/perl
use Math::VectorReal qw( :all );

#(my %coor,my $chnum)=read_pdb($ARGV[0]);
my %coor=read_pdb($ARGV[0]);
my $dir=$ARGV[1];
my $ch, my $chnum;
foreach my $r ( sort keys %{$coor{"0"}}){ my $ggg=substr($r,0,1); if ( $ggg ne $ch){$chnum++; $ch=$ggg}   };

my %qwa=find_quart( $coor{"0"} ); my $qnum=keys %qwa;

if ($qnum >0){
#system("mkdir $ARGV[1]");
my $filename=$ARGV[0];
$filename=~ s/^.*\///;
$filename=~ s/\.pdb//;
#$filename=$chnum."_".$qnum."/".$filename.".dat";
$filename="$dir/".$filen
print  "$filename\n";
open OUT,">$filename";
print OUT "#INFO  chain $chnum qnum $qnum \n";

  foreach my $m (sort {$a<=>$b} keys %coor){
    my  %qartets= %qwa ; #find_quart( $coor{$m} );
    my  %q= find_q( $coor{$m} );

#       foreach my $q ( keys  %qartets){ print join " ",@{ $qartets{$q} },"\n"; }

        foreach my $q ( keys  %qartets){

          my $nx; my $ny; my $nz;
          my $ox; my $oy; my $oz;
              my $r;

          foreach my $res     ( @{ $qartets{$q} }){
#                     print "$q $coor{$m}{$res}{"N9"}->x,"\n";
              $nx=$nx+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->x;
              $ny=$ny+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->y;
              $nz=$nz+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->z;

              $ox=$ox+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->x;
              $oy=$oy+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->y;
              $oz=$oz+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->z;
```

Нуклеотид РНК



основание

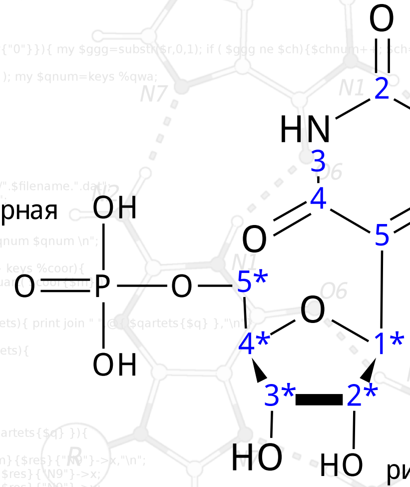
Ортофосфорная кислота

N-гликозидная связь

рибоза

#!/usr/bin/perl
use Math::VectorReal qw(:all);
#(my %coor,my $chnum)=read_pdb($ARGV[0]);
my %coor=read_pdb($ARGV[0]);
my $dir=$ARGV[1];
my $ch, my $chnum;
foreach my $r (sort keys %{$coor{"0"}}){ my $ggg=substr($r,0,1); if ($ggg ne $ch){$chnum++; $ch=$ggg}   };
my %qwa=find_quart($coor{"0"}); my $qnum=keys %qwa;
if ($qnum >0){
#system("mkdir $ARGV[1]");
my $filename=$ARGV[0];
$filename=~ s/^.*\///;
$filename=~ s/\.pdb//;
#$filename=$chnum."_".$qnum."/".$filename.".dat";
$filename="$dir/".$filename.".dat";
print "$filename\n";
open OUT,">$filename";
print OUT "#INFO chain $chnum qnum $qnum \n";
foreach my $m (sort {$a<=>$b} keys %coor){
my %qartets= %qwa ; #find_quart($coor{$m});
my %q= find_q($coor{$m});
#   foreach my $q (keys %qartets){ print join " ",@{ $qartets{$q} },"\n"; }
foreach my $q (keys %qartets){
my $nx; my $ny; my $nz;
my $ox; my $oy; my $oz;
my $r;
foreach my $res   (@{ $qartets{$q} }){
#   print "$q $coor{$m}{$res}{"N9"}->x,"\n";
$nx=$nx+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->x;
$ny=$ny+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->y;
$nz=$nz+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->z;
$ox=$ox+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->x;
$oy=$oy+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->y;
$oz=$oz+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->z;

Псевдоуридин



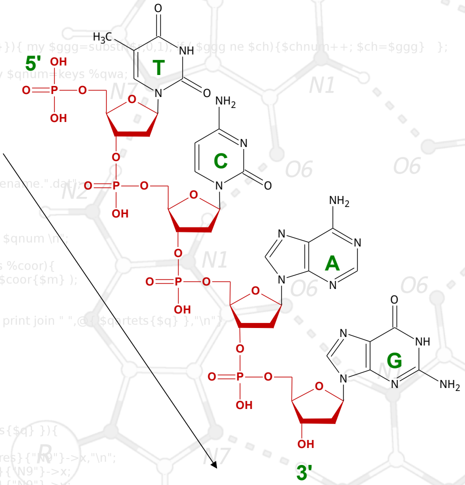
Ортофосфорная кислота

основание

гликозидная связь

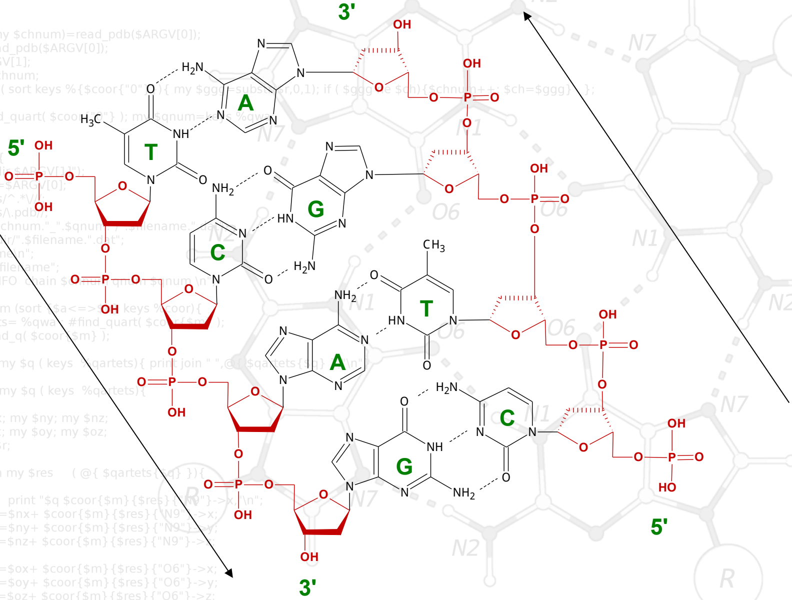
рибоза

Цепь ДНК



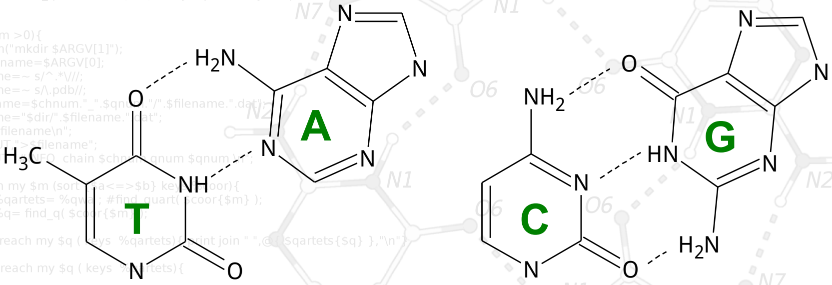
#!/usr/bin/perl
use Math::VectorReal qw(:all);
#(my %coor,my $chnum)=read_pdb($ARGV[0]);
my %coor=read_pdb($ARGV[0]);
my $dir=$ARGV[1];
my $ch, my $chnum;
foreach my $r (sort keys %{$coor{"0"}}){ my $ggg=substr($r,0,1); if ($ggg ne $ch){$chnum++; $ch=$ggg}   };
my %qwa=find_quart($coor{"0"}); my $qnum=keys %qwa;
if ($qnum >0){
#system("mkdir $ARGV[1]");
my $filename=$ARGV[0];
$filename=~ s/^.*\///;
$filename=~ s/\.pdb//;
#$filename=$chnum."_".$qnum."/".$filename.".dat";
$filename="$dir/".$filename.".dat";
print "$filename\n";
open OUT,">$filename";
print OUT "#INFO chain $chnum qnum $qnum \n";
foreach my $m (sort {$a<=>$b} keys %coor){
my %qartets= %qwa ; #find_quart($coor{$m});
my %q= find_q($coor{$m});
#   foreach my $q (keys %qartets){ print join " ",@{ $qartets{$q} },"\n"};
foreach my $q (keys %qartets){
my $nx; my $ny; my $nz;
my $ox; my $oy; my $oz;
my $r;
foreach my $res   (@{ $qartets{$q} }){
#   print "$q $coor{$m}{$res}{"N9"}->x,"\n";
$nx=$nx+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->x;
$ny=$ny+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->y;
$nz=$nz+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->z;
$ox=$ox+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->x;
$oy=$oy+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->y;
$oz=$oz+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->z;

Двойная цепь ДНК



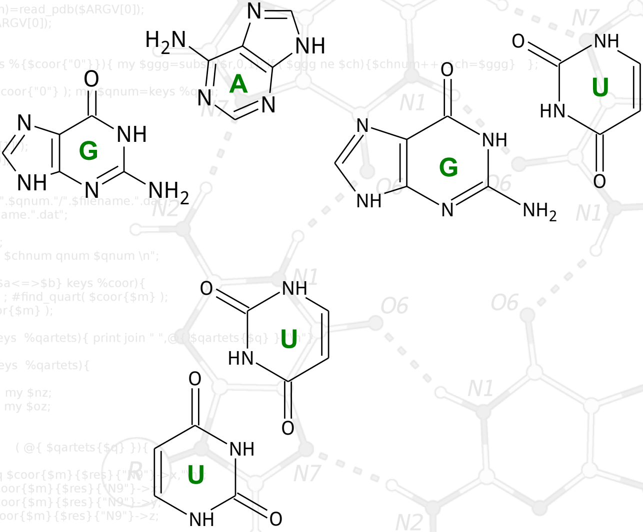
```
#!/usr/bin/perl
use Math::VectorReal qw( :all );
use Math::Trig;
use strict;

#(my %coor,my $chnum)=read_pdb($ARGV[0]);
my %coor=read_pdb($ARGV[0]);
my $dir=$ARGV[1];
my $ch, my $chnum;
foreach my $r ( sort keys %{$coor{"0"}}){ my $ggg=substr($r,0,1); if ( $ggg ne $ch){$chnum++; $ch=$ggg} };

my %qwa=find_quart( $coor{"0"} ); my $qnum=keys %qwa;

if ($qnum >0){
#system("mkdir $ARGV[1]");
my $filename=$ARGV[0];
$filename=~ s/^.*\///;
$filename=~ s/\.pdb//;
#$filename=$chnum."_".$qnum."_".$filename.".dat";
$filename="$dir/".$filename.".dat";
print "$filename\n";
open OUT,">$filename";
print OUT "#INFO chain $chnum qnum $qnum \n";

  foreach my $m (sort {$a<=>$b} keys %coor){
    my %qartets= %qwa; #find_quart( $coor{$m} );
    my %q= find_q( $coor{$m} );

#      foreach my $q ( keys %qartets){ print join " ",@{ $qartets{$q} },"\n"}

       foreach my $q ( keys %qartets){

         my $nx; my $ny; my $nz;
         my $ox; my $oy; my $oz;
            my $r;

         foreach my $res    ( @{ $qartets{$q} }){

#                   print "$q $coor{$m}{$res}{"N9"}->x,"\n";
              $nx=$nx+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->x;
              $ny=$ny+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->y;
              $nz=$nz+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->z;

              $ox=$ox+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->x;
              $oy=$oy+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->y;
              $oz=$oz+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->z;
```

Канонические взаимодействия



Неканонические взаимодействия

```
#!/usr/bin/perl
use Math::VectorReal qw( :all );
use Math::Trig;
use strict;

#(my %coor,my $chnum)=read_pdb($ARGV[0]);
my %coor=read_pdb($ARGV[0]);
my $dir=$ARGV[1];
my $ch, my $chnum;
foreach my $r ( sort keys %{$coor{"0"}}){ my $ggg=substr($r,0,1); if ( $ggg ne $ch){$chnum++; $ch=$ggg}   };

my %qwa=find_quart( $coor{"0"} ); my $qnum=keys %qwa;

if ($qnum >0){
#system("mkdir $ARGV[1]");
my $filename=$ARGV[0];
$filename=~ s/^.*\///;
$filename=~ s/\.pdb//;
#$filename=$chnum."_".$qnum."/".$filename.".dat";
$filename="$dir/".$filename.".dat";
print  "$filename\n";
open OUT,">$filename";
print OUT "#INFO  chain $chnum qnum $qnum \n";

  foreach my $m (sort {$a<=>$b} keys %coor){
    my  %qartets= %qwa ; #find_quart( $coor{$m} );
    my  %q= find_q( $coor{$m} );

#       foreach my $q ( keys  %qartets){ print join " ",@{ $qartets{$q} }."\n"}

        foreach my $q ( keys  %qartets){

          my $nx; my $ny; my $nz;
          my $ox; my $oy; my $oz;
              my $r;

          foreach my $res     ( @{ $qartets{$q} }){

#                          print "$q $coor{$m}{$res}{"N9"}->x,"\n";
                $nx=$nx+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->x;
                $ny=$ny+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->y;
                $nz=$nz+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->z;

                $ox=$ox+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->x;
                $oy=$oy+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->y;
                $oz=$oz+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->z;
```



Структура ДНК

```
#!/usr/bin/perl
use Math::VectorReal qw( :all );

#(my %coor,my $chnum)=read_pdb($ARGV[0]);
my %coor=read_pdb($ARGV[0]);
my $dir=$ARGV[1];
my $ch, my $chnum;
foreach my $r ( sort keys %

my %qwa=find_quart( $coo


if ($qnum >0){
#system("mkdir $ARGV[1]"
my $filename=$ARGV[0];
$filename=~ s/^.*\///;
$filename=~ s/\.pdb//;
#$filename=$chnum."_".$c
$filename="$dir/".$filenam
print  "$filename\n";
open OUT,">$filename";
print OUT "#INFO  chain $c

  foreach my $m (sort {$a<
    my  %qartets= %qwa ; #
    my  %q= find_q( $coor{$

#       foreach my $q ( keys

        foreach my $q ( keys

          my $nx; my $ny; my
          my $ox; my $oy; my
              my $r;

          foreach my $res     (

#                    print "$q $c
            $nx=$nx+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->x;
            $ny=$ny+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->y;
            $nz=$nz+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->z;

            $ox=$ox+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->x;
            $oy=$oy+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->y;
            $oz=$oz+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->z;
```

Структура ДНК

Структура ДНК впервые была предложена Watson и Crick в 1953 на основе результатов РСА низкого разрешения

Основные свойства:

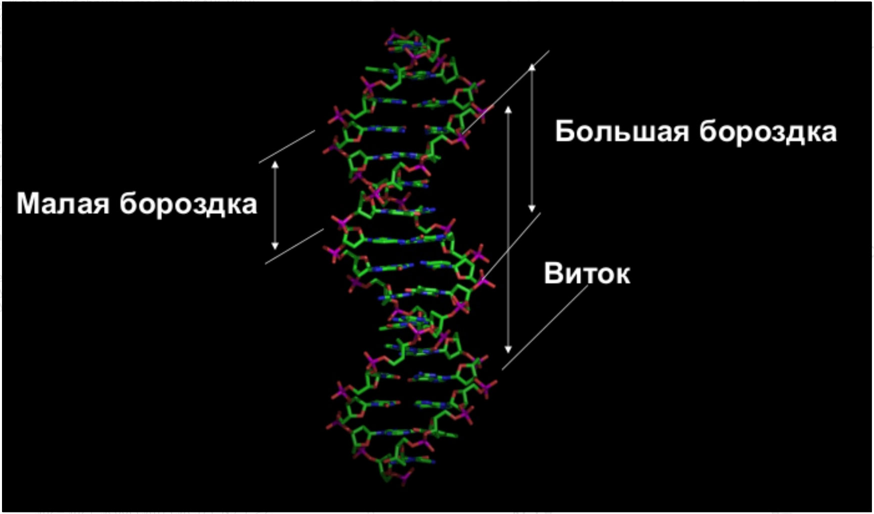
- Две антипараллельные цепи
- ДНК это двойная спираль
- Имеет две оси симметрии

Взаимодействия в ДНК

Два типа взаимодействий гетероциклических оснований в ДНК.

- Копланарные взаимодействия (в одной плоскости). В основном реализуются как водородные связи.
- Стопочные взаимодействия основаны на Ван-дер-Ваальсовых взаимодействиях.

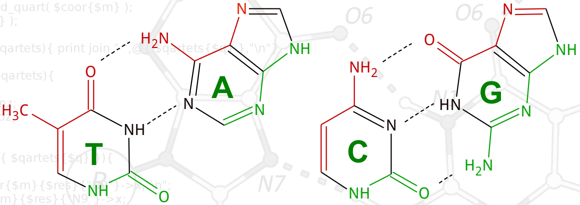
Спираль ДНК



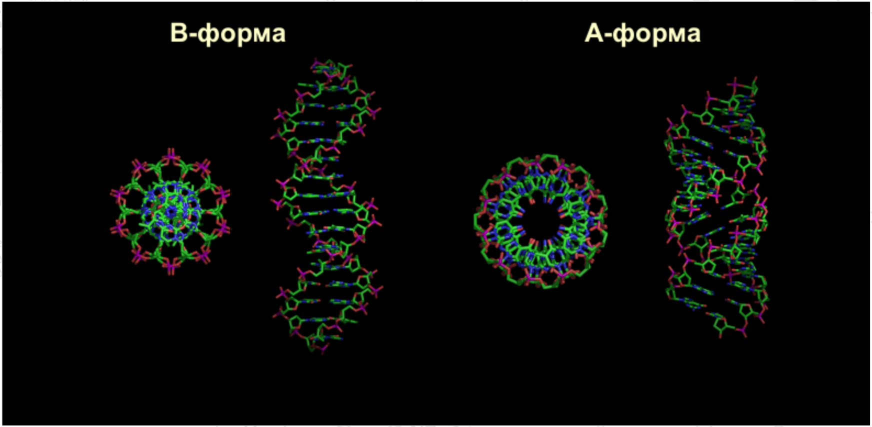
#!/usr/bin/perl
use Math::VectorReal qw(:all);
$ox=$ox+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->x;
$oy=$oy+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->y;
$oz=$oz+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->z;

Атомы принадлежащие большой и малой бороздкам

	Большая бороздка	**Малая бороздка**
Adenine	C6, N6, C5, N7, C5	C2, N3, C4, N9
Guanine	C6, O6, C5, N7, C8	C2, N2, N3, C4, N9
Cytosine	C6, C5, C4, N4	O2, N1, C2
Thymine	C6, C5, C4, O4, C5M	O2, C2, N1, C6

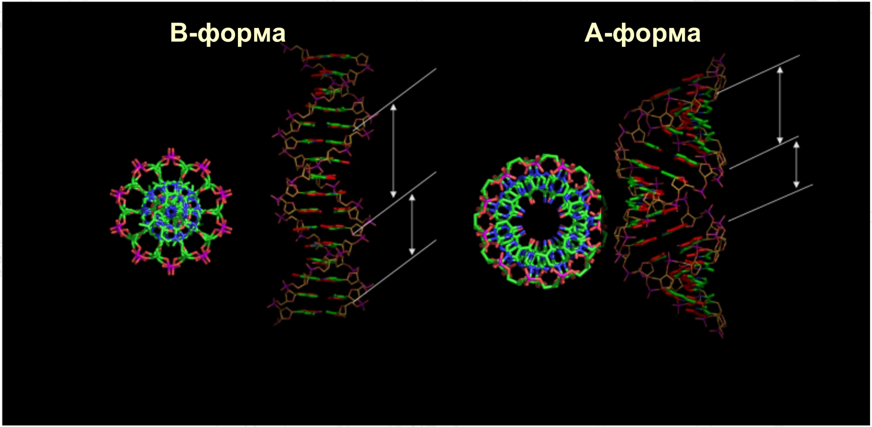


Регулярные формы спирали ДНК



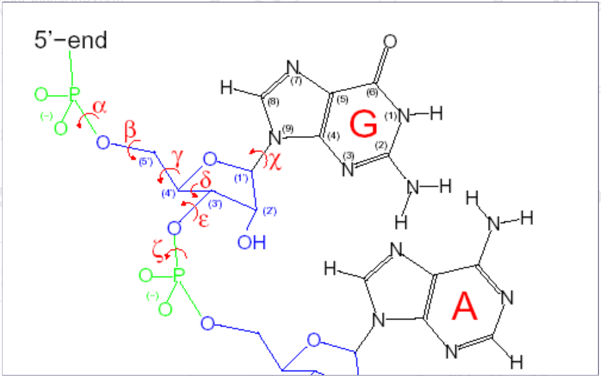
```
#!/usr/bin/perl
use Math::VectorReal qw( :all );

#(my %coor,my $chnum)=read_pdb($ARGV[0]);
my %coor=read_pdb($ARGV[0]);
my $dir=$ARGV[1];

#                 print "$q $coor{$m}{$res}{"N9"}->x,"\n";
        $nx=$nx+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->x;
        $ny=$ny+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->y;
        $nz=$nz+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->z;

        $ox=$ox+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->x;
        $oy=$oy+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->y;
        $oz=$oz+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->z;
```

Регулярные формы спирали ДНК



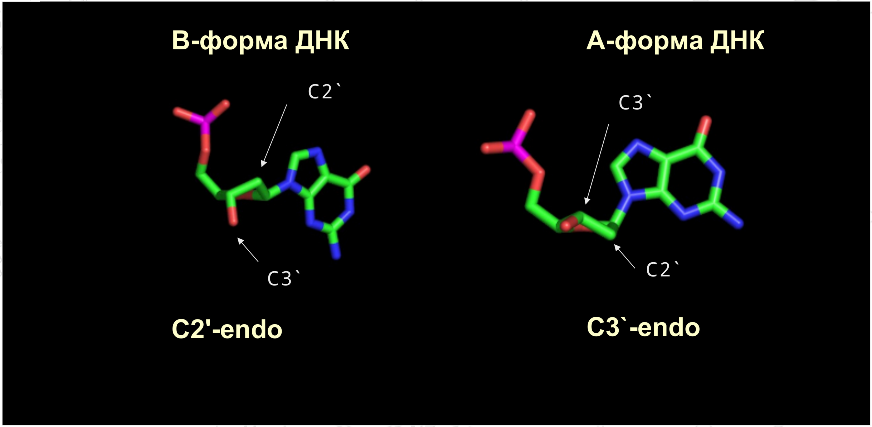
#!/usr/bin/perl
use Math::VectorReal qw(:all);
use strict;
#(my %coor,my $chnum)=read_pdb($ARGV[0]);
my %coor=read_pdb($ARGV[0]);
my $dir=$ARGV[1];
# print "$q $coor{$m}{$res}{"N9"}->x,"\n";
$nx=$nx+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->x;
$ny=$ny+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->y;
$nz=$nz+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->z;
$ox=$ox+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->x;
$oy=$oy+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->y;
$oz=$oz+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->z;

Торсионные углы НК



	α P-O5'	β O5'-C5 '	γ C5'-C4'	δ P C4'-C3'	ε C3'-O3'	ξ O3'-P	χ C1'-N
A-DNA	-62	173	52	88 3	178	-50	-160
B-DNA	-63	171	54	123 131	155	-90	-117

Конформация дезоксирибозы



Условия существования различных форм

Разные формы ДНК переходят друг в друга при изменении условий внешней среды:

- B-форма стабильна при нормальных физиологических условиях
- Дегидратация, понижение относительной влажности до 0.75 инициирует переход B=>A

Пример: смеси вода-этанол(метанол) при росте доли спирта > 0.75 , переход B=>A

Переход ДНК из A в B форму в солевом растворе

#!/usr/bin/perl
use Math::VectorReal qw(:all);
use
use

#(my %coor,my $chnum)=read_pdb($ARGV[0]);
my %coor=read_pdb($ARGV[0]);
my $dir=$ARGV[1];
my $ch, my $chnum;
foreach my $r (sort keys %

my %qwa=find_quart($coo

if ($qnum >0){
#system("mkdir $ARGV[1]"
my $filename=$ARGV[0];
$filename=~ s/^.*\///;
$filename=~ s/\.pdb//;
#$filename=$chnum."_".$c
$filename="$dir/".$filenam
print "$filename\n";
open OUT,">$filename";
print OUT "#INFO chain $c

foreach my $m (sort {$a<
my %qartets= %qwa ; #
my %q= find_q($coor{$

foreach my $q (keys

foreach my $q (keys

my $nx; my $ny; my
my $ox; my $oy; my
my $r;

foreach my $res (

print "$q $coor{$m}{$res}{"N9"}->x; \n";
$nx=$nx+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->x;
$ny=$ny+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->y;
$nz=$nz+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->z;

$ox=$ox+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->x;
$oy=$oy+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->y;
$oz=$oz+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->z;

Переход ДНК из А в В форму в солевом растворе

#!/usr/bin/perl
use Math::VectorReal qw(:all);

#(my %coor,my $chnum)=read_pdb($ARGV[0]);
my %coor=read_pdb($ARGV[0]);
my $dir=$ARGV[1];
my $ch, my $chnum;
foreach my $r (sort keys %

my %qwa=find_quart($coo

if ($qnum >0){
#system("mkdir $ARGV[1]"
my $filename=$ARGV[0];
$filename=~ s/^.*\///;
$filename=~ s/\.pdb//;
#$filename=$chnum."_".$c
$filename="$dir/".$filenam
print "$filename\n";
open OUT,">$filename";
print OUT "#INFO chain $c

foreach my $m (sort {$a<
my %qartets= %qwa ; #
my %q= find_q($coor{$

foreach my $q (keys

foreach my $q (keys

my $nx; my $ny; my
my $ox; my $oy; my
my $r;

foreach my $res (

$nx=$nx+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->x;
$ny=$ny+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->y;
$nz=$nz+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->z;

$ox=$ox+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->x;
$oy=$oy+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->y;
$oz=$oz+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->z;

Структура РНК

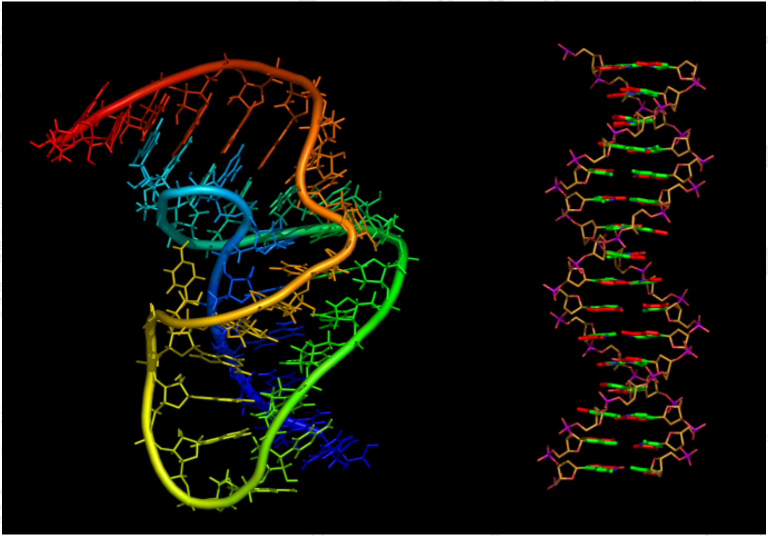
Структура РНК

Основные свойства.

- Одно-цепочечная молекула
- В клетке найдено множество видов РНК и каждый из них имеет специфичную функцию.

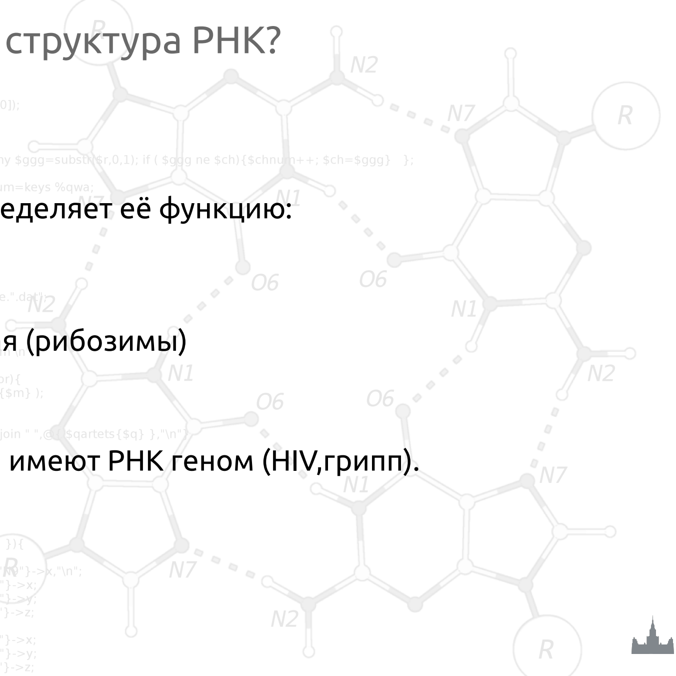
Основные типы: рРНК, мРНК, тРНК.

РНК и ДНК



#!/usr/bin/perl
use Math::VectorReal qw(:all);
$ox=$ox+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->x;
$oy=$oy+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->y;
$oz=$oz+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->z;

Почему важна структура РНК?

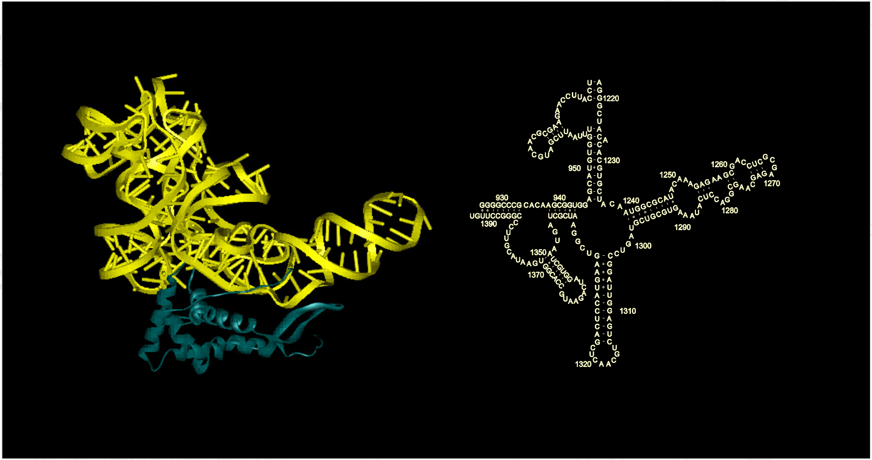


Структура РНК определяет её функцию:

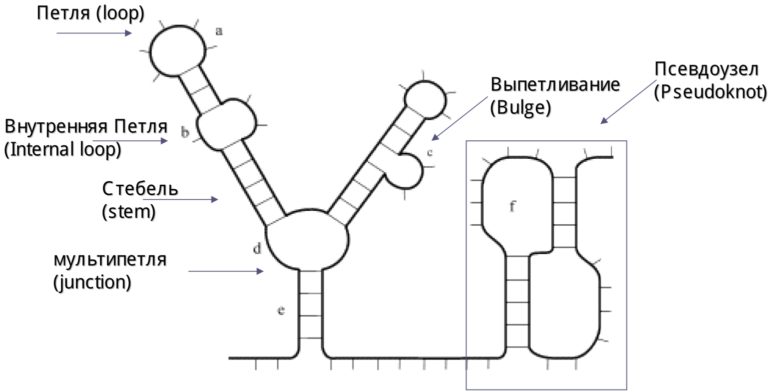
- Регуляторная
- Структурная
- Каталитическая (рибозимы)

Некоторые вирусы имеют РНК геном (HIV,грипп).

Вторичная структура РНК



Вторичная структура РНК



Петля (loop)

Внутренняя Петля (Internal loop)

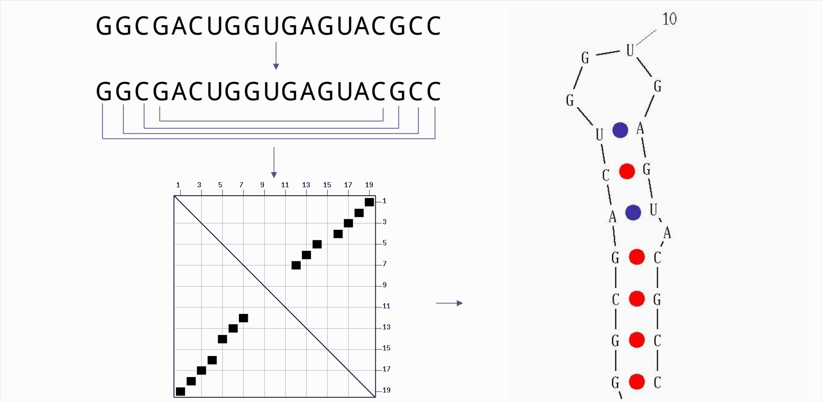
Стебель (stem)

мультипетля (junction)

Выпетливание (Bulge)

Псевдоузел (Pseudoknot)

Возможность предсказания вторичной структуры



Расчёт энергии структуры по алгоритму Зукера

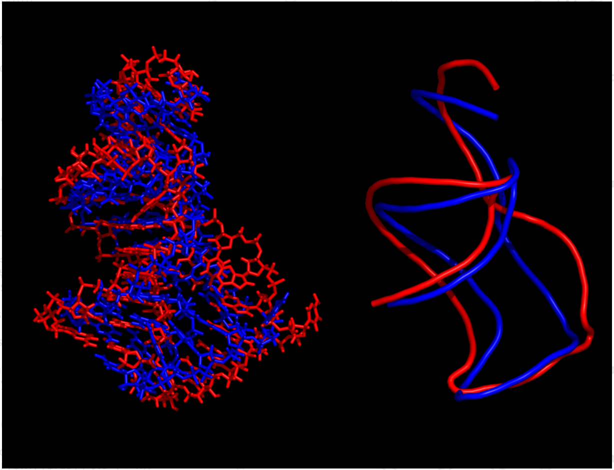
UU Петля +5.9 Ккал/моль
A A
G C Стэкинг+Пара –2*2.9 Ккал/моль
G C
A Выпетливание + 3.3 Ккал/моль
G C Стекинг+Пара –1.8 Ккал/моль
U A -0.9 Ккал/моль
A U -1.8 Ккал/моль
C G -2.1 Ккал/моль
A U 3′
A Неструктурированный 5`конец 0 Ккал/моль
A
5′

Δ G = -3.2 Ккал/моль

РНК, которые трудно предсказать алгоритмом Зукера

- РНК связанная с белками.
- Длинные РНК.
- Псевдоузлы.

Моделирование структуры



Вопросы?

```
#!/usr/bin/perl
use Math::VectorReal qw( :all );
use Math::Trig;
use strict;


#(my %coor,my $chnum)=read_pdb($ARGV[0]);
my %coor=read_pdb($ARGV[0]);
my $dir=$ARGV[1];
my $ch, my $chnum;
foreach my $r ( sort keys %{$coor{"0"}}){ my $ggg=substr($r,0,1); if ( $ggg ne $ch){$chnum++; $ch=$ggg}   };

my %qwa=find_quart( $coor{"0"} ); my $qnum=keys %qwa;


if ($qnum >0){
#system("mkdir $ARGV[1]");
my $filename=$ARGV[0];
$filename=~ s/^.*\///;
$filename=~ s/\.pdb//;
#$filename=$chnum."_".$qnum."/".$filename.".dat";
$filename="$dir/".$filename.".dat";
print  "$filename\n";
open OUT,">$filename";
print OUT "#INFO  chain $chnum qnum $qnum \n";

  foreach my $m (sort {$a<=>$b} keys %coor){
    my  %qartets= %qwa ; #find_quart( $coor{$m} );
    my  %q= find_q( $coor{$m} );

#       foreach my $q ( keys  %qartets){ print join " ",@{ $qartets{$q} },"\n"}

        foreach my $q ( keys  %qartets){

          my $nx; my $ny; my $nz;
          my $ox; my $oy; my $oz;
              my $r;

          foreach my $res     ( @{ $qartets{$q} }){

#                       print "$q $coor{$m}{$res}{"N9"}->x,"\n";
               $nx=$nx+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->x;
               $ny=$ny+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->y;
               $nz=$nz+ $coor{$m}{$res}{"N9"}->z;

               $ox=$ox+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->x;
               $oy=$oy+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->y;
               $oz=$oz+ $coor{$m}{$res}{"O6"}->z;
```