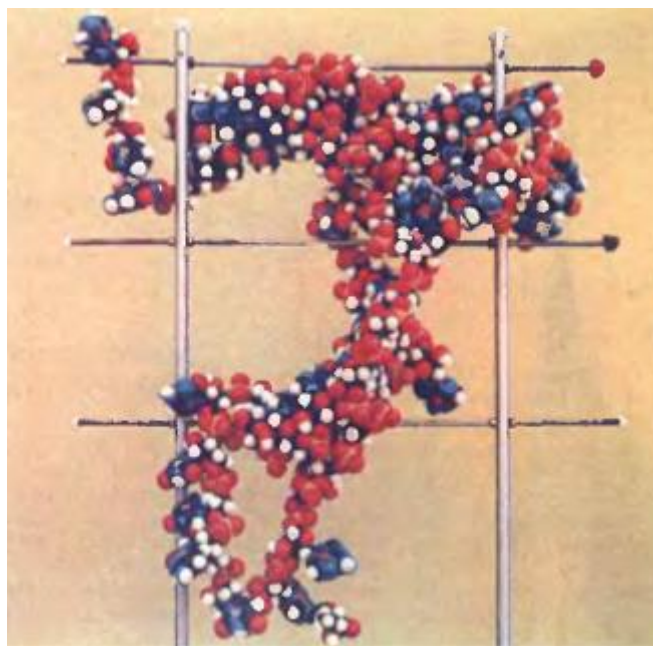


Из писем в редакцию

Модели, которые пока есть у немногих

Устройства, позволяющие конкретно, зримо представлять облик молекул, — не только превосходные учебные пособия, но и нередко незаменимый инструмент исследований. Приведу только один пример. В сложных соединениях нередко получается, что далекие, никак не связанные между собой, если судить по «бумажной» формуле, атомы в действительности сближены, чуть ли не втиснуты друг в друга. И это определяет многие свойства вещества. Простейший, не требующий никаких ЭВМ способ предсказать, измерить эту и другие геометрические особенности молекулы — собрать ее модель. Лабораторией молекулярного моделирования НИИ общей и молекулярной патологии Тартуского университета совместно с сотрудниками Института биофизики АН СССР (Пущино) разработаны модели нового типа, превосходящие известные в мировой практике аналоги как по точности монтажа, так и — что особенно существенно — по прочности крепления «атомов». Строго воспроизводя атомные радиусы и длины связей, увеличенные в 10^8 раз, а также межатомные углы, соответствующие последним данным кристаллографии и рентгеноструктурного анализа, они позволяют успешно воссоздавать строение и конформационные превращения даже таких крупных макромолекул, как молекулы белков и нуклеиновых кислот. Последнее обеспечивается также множественностью разновидностей, в которых представлены атомы ключевых элементов (в частности, предусмотрены специальные «фосфор» и «кислород» для сахарофосфатных цепей, «углерод» для неплоских пятичленных циклов).

В нашей лаборатории новые модели применялись, чтобы исследовать строение двойного липидного слоя биологических мембран, а также пространственную структуру транспортных РНК.



Собранная модель транспортной РНК

При изучении более простых систем набор таких «атомов», снабженный комплектом вспомогательного инструмента, также весьма удобен для измерения атомных координат и двугранных конформационных углов, для построения трехмерных структур непосредственно по данным так называемых карт электронной плотности.

Новые отечественные модели (они демонстрировались на выставке «Биохимия-84» в Москве, где вызвали немалый интерес советских и зарубежных специалистов) ныне патентуются во многих странах: присвоенный им товарный знак зарегистрирован в 20 государствах.

Р. МИКЕЛЬСААР,

зав. лабораторией молекулярного моделирования НИИ общей и молекулярной патологии ТГУ