

ИССЛЕДОВАНИЕ УПАКОВКИ ДНК В СФЕРИЧЕСКУЮ ОБОЛОЧКУ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Ягафарова К.М., Жмуров А.А.

Московский физико-технический институт, Россия, 141701, Долгопрудный,
Институтский пер. 9, yagafarova@phystech.edu

По структуре простейшие вирусы представляют собой генетический материал (РНК или ДНК), окруженный белковой оболочкой (капсидой) нанометрового размера, которая предназначена для защиты и доставки генома. Для исследования структуры и морфологии вирусных частиц широко используются экспериментальные методы, например электронная микроскопия (ЭМ). С помощью ЭМ уже было получено большое количество структур белковой оболочки капсида, однако точно определить структуру упакованного генетического материала экспериментальными методами до сих пор не получилось.

В данной работе, процесс упаковки двухцепочечной ДНК внутрь капсида был исследован методами молекулярного моделирования. В качестве модели ДНК была выбрана крупнозернистая модель MRG-CG, структурным элементом которой является один нуклеотид. Отличительной особенностью модели является явное задание ионов и чувствительность механических параметров ДНК к ионной силе. Оболочка капсида описывалась как отталкивающая сфера. Моделирование упаковки генетического материала внутрь капсида было произведено в программном пакете ASAP MD, созданная для моделирования биологических молекул в крупнозернистом приближении на графических процессорах.

В результате моделирования было показано, что ДНК упаковывается внутрь капсида слоями, количество которых зависит от длины ДНК, размера капсида и ионной силы раствора. Были также получены зависимости внутреннего давления капсида от перечисленных параметров, было показано, что внутреннее давление капсида при физиологических условиях соответствовало экспериментальным данными. Также проведено сравнение сжатых структур ДНК и определен минимальный радиус сжатия для различных систем.