

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА DPS КАК ГИСТОНОПОДОБНОГО БЕЛКА

**Терешкина К.Б., Терешкин Э.В., Коваленко В.В., Лойко Н.Г.², Зуйкова А.А.³,
Крупянский Ю.Ф.**

ФИЦ ХФ РАН, Россия, 119991, Москва, ул. Косыгина, д. 4, +7(495)9397539,
ksenia.tereshkina@gmail.com

¹ФИЦ Биотехнологии РАН, Россия, 119071, Москва, Ленинский проспект, д. 33, стр. 2

²РХТУ им. Д.И. Менделеева, Россия, 125047, Москва, Миусская пл., д. 9

В условиях стресса бактериальные клетки способны задействовать особый механизм стабилизации нуклеоида - биокристаллизацию. Основной белок, участвующий в этом процессе - белок DPS (DNA-Binding Protein from Starved Cells, ДНК-стабилизирующий белок [впервые выделенный] из голодающих клеток). Этот белок представляет собой гомододекамер, субъединицы которого расположены таким образом, что образуют шар с полостью внутри. Полость служит для деактивации ионов Fe²⁺, в то время как внешняя часть белка связывает молекулы ДНК. Сокристаллизация DPS и ДНК приводит к образованию чрезвычайно устойчивых кристаллов, сохраняющих ДНК нуклеоида при разных видах стресса. В работе исследуются гистоноподобные свойства белка DPS, а также его комплексов и кристаллов с точки зрения возможности образования и стабилизации сложных пространственных структур ДНК, при её связывании белком. Динамика систем изучена классическим методом молекулярной динамики с помощью программного комплекса Gromacs в полноатомном и крупнозернистом приближениях. Найдены структурно-динамические особенности комплексов ДНК-DPS. Предложены модели расположения ДНК относительно молекул DPS в нанокристаллах.

Работа выполнена с использованием вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСЦ РАН), проект СНРН2. Работа проводилась в рамках государственного задания Минобрнауки, тема 0082-2014-0001, № АААА-А17-117040610310-6.