

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ НАНОКРИСТАЛЛОВ ДНК С ДНК-СТАБИЛИЗИРУЮЩИМ БЕЛКОМ DPS

Терешкин Э.В., Чуличков А.Л., Коваленко В.В., Терешкина К.Б., Крупянский Ю.Ф.

Институт химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Москва, Россия

В данной работе методами молекулярного моделирования проведено изучение динамики гистоноподобного ДНК-стабилизирующего белка DPS с молекулами ДНК. Изучена динамика небольших фрагментов ДНК плазмиды pBluescript SK (+) [1]. Работа является частью проекта, включающего в себя экспериментальные исследования *in vivo* и *in vitro* биокристаллизации подвергнутых стрессу клеток *E. coli* с помощью синхротронного излучения в Европейском центре синхротронного излучения (ESRF) и теоретических молекулярно-динамических исследований [2]. Биокристаллизация нуклеоида представляет собой адаптационный механизм, используемый подвергнутыми стрессу бактериальными клетками, недостаточно изученный до настоящего времени [3].

Построены coarse grained модели систем, содержащие белок DPS и фрагменты ДНК в различных концентрациях. Определены структурные, энергетические и динамические характеристики комплексов DPS-DPS и DPS-ДНК при образовании нанокристаллов. Обнаружено, что формирование тех или иных комплексов зависит от концентрации фрагментов ДНК и белка. Полученные данные позволили предсказать формирование и структуру кристаллов в экспериментальных системах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, уникальный идентификатор проекта RFMEFI61616X0070. Расчёты выполнены на оборудовании ЦКП МСЦ РАН (проект chph2), УНУ «Суперкомпьютер МВС-10П», УНУ «Суперкомпьютер «Ломоносов-2»».

Литература.

1. https://www.addgene.org/browse/sequence_vdb/1951/
2. Ю.Ф. Крупянский и др. Биокристаллизация в клетках и спорах бактерий и грибов // Кристаллография. 2017. Т. 62 (в печати)
3. Minsky A. et al. Stress, order and survival // Nat. Rev. Mol. Cell Biol. 2002. V. 3. P. 50.