

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДНК-СТАБИЛИЗИРУЮЩЕГО БЕЛКА DPS БАКТЕРИИ *ESCHERICHIA COLI* С ДНК РАЗНОЙ ДЛИНЫ

Терешкина К.Б., Терешкин Э.В., Крупянский Ю.Ф.

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова  
Российской академии наук, Россия, 19991, Москва, ул. Косыгина, 4, +7(495)939-71-14,  
ksenia.tereshkina@chph.ras.ru

Одним из важнейших белков бактерий и архей в стрессовых условиях является ДНК-связывающий белок Dps (DNA-binding protein from starved cells) [1]. Это гомолог ферритина, шаровидной формы с полостью внутри. Основные функции Dps *Escherichia coli*: секвестрация  $Fe^{2+}$  для предотвращения реакции Фентона и сохранение ДНК с путём образования сокристаллов и комплексов ДНК-Dps во время стационарной фазы роста бактериальной культуры [2]. Несмотря на большое количество работ в данной области, молекулярные механизмы и тип связывания ДНК с белком Dps до сих пор не ясен. Поэтому целью данной работы было исследование кристаллов Dps *E. coli* с молекулами ДНК различной длины и состава методами молекулярной динамики и термодинамического интегрирования. Расчёты проведены с использованием пакета GROMACS в силовом поле MARTINI по разработанному в [3] протоколу.

Было показано, что связывание ДНК с Dps зависит от формы и размера кристалла белка, длины и состава ДНК, ионной силы раствора. Раствор с концентрацией ионов, соответствующей цитоплазме *E. coli*, может быть более благоприятным для связывания ДНК в комплексах ДНК-белок, а с низкой ионной силой – для сокристаллизации. Длинноцепочечные молекулы ДНК адсорбируются на сформированные кристаллы Dps неравномерно. Сокристаллизации ДНК с Dps способствует образованию симметричных форм в нанокристаллах. Аффинность связывания с поверхностью Dps больше у участков геномной ДНК, обладающих наибольшей специфичностью к белку Dps.

Расчёты проводились на высокопроизводительной вычислительной системе МВС-10П в Межведомственном суперкомпьютерном центре Российской академии наук (МСЦ РАН). Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки.

## Литература

1. *Almirón M., Link A.J., Furlong D., Kolter R.* A novel DNA-binding protein with regulatory and protective roles in starved *Escherichia coli* // *Genes Dev.* **6**, 1992. 2646-2654. <https://doi.org/10.1101/gad.6.12b.2646>
2. *Williams SM, Chatterji D.* An Overview of Dps: Dual Acting Nanovehicles in Prokaryotes with DNA Binding and Ferroxidation Properties // *Subcell Biochem.* **96**, 2021. 177-216. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-58971-4\\_3](https://doi.org/10.1007/978-3-030-58971-4_3)
3. *Tereshkin, E. V., Tereshkina, K. B., Krupyanskiy, Y. F.* Predicting Binding Free Energies for DPS Protein-DNA Complexes and Crystals Using Molecular Dynamics. // *Supercomputing Frontiers and Innovations.* **9**, 2, 2022. 33–45. <https://doi.org/10.14529/jsfi220203>