

СКРЫТАЯ СИММЕТРИЯ МАЛЫХ СФЕРИЧЕСКИХ ВИРУСОВ

Коневцова О.В., Рошаль С.Б.

Южный федеральный университет, Россия, 344090, Ростов-на-Дону, ул. Зорге,5,
khelgla@yandex.ru

Структурная организация большинства вирусных оболочек (капсидов) может быть описана в рамках геометрической модели Каспара и Клуга (КК). Однако существует растущее число экспериментально определенных структур малых вирусов $T \leq 6$, которые ей не соответствуют. Например, хорошо известны структуры капсидов L-A вируса, вируса лихорадки, вируса Западного Нила и других аналогичных вирусов. Ряд геометрических и физических идей объясняют устройство подобных капсидов при условии отказа от геометрической модели Каспара и Клуга, но при сохранении предложенных ими симметричных принципов. Мы не отказываемся от геометрической модели КК, а лишь предлагаем ее некоторую модификацию. Предложенный подход проясняет принципы структурной организации капсидов малых вирусов, как удовлетворяющих, так и не удовлетворяющих КК модели. В традиционной модели КК в узлах сферических решеток размещаются капсомеры. Модифицированная модель основана на тех же самых сферических решетках, однако в отличие от традиционной модели, в модифицированной модели в решеточных узлах с тривиальной локальной симметрией размещаются асимметричные протеины, а узлы с нетривиальной симметрией остаются вакантными. Как традиционная, так и модифицированная модели выявляют скрытую (нарушенную) симметрию малых вирусных капсидов. Однако модифицированная модель, во-первых, пригодна для анализа тех капсидов, для которых не работает традиционная модель. Во-вторых, в структуре капсидов КК типа модифицированная модель позволит увидеть более мелкомасштабную родительскую сферическую решетку, чем та, которая используется в традиционной модели. Таким образом, предложенный подход лучше выявляет скрытую симметрию в структурной организации малых вирусных капсидов.

На основе предложенного подхода также рассматривается устройство вирусных капсидов с двойной белковой оболочкой. Рассмотрен пример капсида риновируса, в котором внутренняя оболочка попадает под область применимости модифицированной модели, а внешняя – традиционной модели КК. Так как обе модели построены на схожих геометрических принципах, они могут применяться совместно, в том числе для моделирования структур пока еще неоткрытых двойных вирусных оболочек. Высокая степень структурной организации и соразмерность устройства подобных двойных оболочек гарантируется тем, что обе оболочки основываются на одной и той же сферической решетке.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 15-12-10004).