

## ДИНАМИКА НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ДОДЕКАМЕРОВ ДНК-СВЯЗЫВАЮЩЕГО БЕЛКА DPS

Терешкина К.Б.<sup>1,2</sup>, Синицын Д.О.<sup>1</sup>, Чуличков А.Л.<sup>1</sup>, Крупянский Ю.Ф.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Россия, 119991, Москва, ул. Косыгина, 4, (495)9397300, ksenia.tereshkina@gmail.com

<sup>2</sup>РХТУ им. Д.И. Менделеева, Россия, 125047, Миусская пл., 9

Додекамеры белка Dps обладают ДНК-связывающей активностью, защищающей ДНК от окислительного повреждения и играющей важнейшую роль в процессах устойчивости бактериальных клеток к стрессу. В условиях окислительного стресса или голода в бактериальных клетках производится большое количество белка Dps, формирующего сферический олигомер, неспецифически связывающийся с ДНК и приводящий к её компактизации [1].

В работе изучена динамика додекамеров белка Dps в водном окружении с помощью метода молекулярной динамики. Расчеты проводились классическим методом молекулярной динамики с использованием универсального МД пакета Gromacs [2], силовые поля Opls-AA, martini 2.2. Изучались системы, содержащие от 1 до 27 кристаллографических ячеек (4-108 молекул додекамеров). Топологически додекамер Dps можно рассматривать как куб с неоднородными гранями, то есть выделить «грани», «рёбра» и «углы».

Получены энергетические и пространственные характеристики связывания двух додекамеров белка DPS, найдены характеристики минимумов потенциальной энергии для каждого из димеров: значение потенциальной энергии, угла поворота одной из молекул относительно другой и расстояние между центрами масс двух молекул. Показано, что при образовании кристаллов энергетически наиболее выгодными положениями оказываются положения двух молекул друг относительно друга грань-угол и грань-ребро. Обнаружено, что димеризация додекамеров происходит в два этапа. В образовании промежуточных комплексов участвуют подвижные N-концевые участки додекамеров, после чего происходит образование стабильных комплексов всех молекул. Исследование динамики кристаллов выявило высокую стабильность комплексов и позволило определить наиболее выгодные места для связывания ДНК. На основании полученных данных построена модель комплексов додекамеров белка DPS с участком плазмиды pBluescript SK+.

Работа поддержана Минобрнауки России (проект RFMEFI61616X0070). Авторы благодарят МСЦ РАН за доступ к компьютерным кластерам для проведения расчётов.

### Литература

1. R.A. Grant, D.J. Filman et al. The crystal structure of Dps, a ferritin homolog that binds and protects DNA // *Nature Structural Biology*, **5**, 1998, 294-303.
2. H.J.C. Berendsen, et al. GROMACS: A message-passing parallel molecular dynamics implementation // *Comp. Phys. Comm.*, **91**, 1995, 43-56.