

РАСПОЛОЖЕНИЕ ДНК В КОМПЛЕКСАХ С ДНК-СТАБИЛИЗИРУЮЩИМИ БЕЛКАМИ DPS И SASP

Терешкин Э.В.¹, Лойко Н.Г.^{1,2}, Терешкина К.Б.¹, Коваленко В.В.¹, Зуйкова А.А.^{1,3},
Попелковская А.И.^{1,3}, Крупянский Ю.Ф.¹

¹ИХФ РАН, Россия, 119991, Москва, ул. Косыгина, д. 4, +7(495)9397300, ramm@mail.ru

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

³РХТУ им. Д.И. Менделеева, Россия, 125047, Москва, Миусская пл., д. 9

В работе проведено сравнительное изучение структурных особенностей *in vivo* кристаллов бактериальных культур, содержащих кристаллы ДНК-стабилизирующих белков DPS и SASP и соответствующих молекулярных систем. Оба белка участвуют в процессе *in vivo* (био-) кристаллизации нуклеоида, происходящей непосредственно в живой клетке и направленной на сохранение её генетического материала при неблагоприятных условиях. Основным белком, участвующим в процессе биокристаллизации в бактериальной клетке – это белок DPS (DNA-Binding Protein from Starved Cells, ДНК-стабилизирующий белок [впервые выделенный] из голодающих клеток). В спорах бактерий, биокристаллизация нуклеоида происходит с помощью другого класса белков – малых кислоторастворимых белков SASP (Small Acid-Soluble Proteins). Были изучены клетки бактерий *Escherichia coli* штамма K12. В них инициировалась выработка белка DPS, молекулы которого образовывали кристаллы с ДНК [3]. Также изучались споры бактерий *Bacillus cereus*, нуклеоид которых кристаллизуется с участием белка SASP. Проведено сравнение дифрактограмм и кривых рассеяния указанных систем; изучена динамика нанокристаллов белков с короткими палиндромными участками ДНК 5'-GGGGGGGGGA-3'. Динамика комплексов изучалась классическим методом молекулярной динамики с помощью программного комплекса Gromacs 5.1 с использованием специально разработанных протоколов [4]. Определены особенности в структурных, динамических и энергетических характеристиках нанокристаллов белков DPS и SASP с ДНК.

Работа выполнена с использованием вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСЦ РАН), проект СРН2. Работа проводилась в рамках государственного задания Минобрнауки, тема 0082-2014-0001, № АААА-А17-117040610310-6.

Литература

1. *Almirón M. et al.* A novel DNA-binding protein with regulatory and protective roles in starved *Escherichia coli*. // *Genes & Development*. **6 (12B)**, 1992 2646–54.
2. *Dittmann C. et al.* Dormant *Bacillus* spores protect their DNA in crystalline nucleoids against environmental stress. // *J. Struct. Biol.* **191**, 2015, 156–164
3. Ю.Ф. Крупянский и др. Биокристаллизация в клетках и спорах бактерий и грибов // *Кристаллография*, 63, 4, 572-577, DOI 10.1134/S1063774518040144
4. E. Tereshkin et al. Interaction of deoxyribonucleic acid with deoxyribonucleic acid-binding protein from starved cells: cluster formation and crystal growing as a model of initial stages of nucleoid biocrystallization // *JBSD*, DOI: 10.1080/07391102.2018.149245