

# СОЗДАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МОДЕЛЕЙ НУКЛЕОСОМ И ИХ КОМПЛЕКСОВ ПО РАЗНОРОДНЫМ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ДАННЫМ

Армеев Г.А., Шайтан К.В., Шайтан А.К.

Кафедра биоинженерии, биологический факультет, Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова; Россия, 119234, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12 E-mail: [armeev@intbio.org](mailto:armeev@intbio.org)

Нуклеосомы являются основным структурным элементом хроматина и отвечают не только за компактизацию, но и за регуляцию процессов транскрипции, репарации и репликации ДНК. Изменение гистонового состава нуклеосом, связывание с белками хроматина изменяет не только структуру нуклеосом, но и их динамические свойства, которые во многом определяют компактизацию и доступность хроматина для взаимодействий с белками ядра клетки.

Так как прямое изучение структуры и динамики крупных нуклеосомных комплексов на данный момент затруднено, для получения информации об их структуре, подвижности можно использовать набор косвенных подходов, например можно создавать молекулярные модели на основании набора различных результатов экспериментов. Такой подход в последние годы получил название интегративного моделирования (integrative modeling) и реализован в ряде специализированных программ, однако на данный момент существующее программное обеспечение непригодно для создания молекулярных моделей комплексов ДНК-белок в полуавтоматическом режиме.

Нами были разработаны методы для молекулярного моделирования нуклеосом и их комплексов по данным об эффективности Ферстеровского резонансного переноса энергии и профилей интенсивности перекисного расщепления ДНК. Разработанные методы применены для построения моделей нуклеосом в комплексе с линкерным гистоном [1], компактных динуклеосом, а также моделей нуклеосом при взаимодействии с гистоновым шапероном FACS [2].

Работа поддержана грантом РФФИ № 18-74-10006 и выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова

## Литература.

1. Армеев Г.А., Горковец Т. К., Ефимова Д.А., Шайтан К.В., Шайтан А.К. Моделирование структуры ДНК-белковых комплексов с использованием экспериментальных данных по резонансному переносу энергии и перекисному окислению // Вестник Московского университета. Серия 16: Биология, 1, 2016, 35–40
2. Valieva ME, Armeev GA, Kudryashova KS, et al, Large-scale ATP-independent nucleosome unfolding by a histone chaperone // Nature Structural & Molecular Biology. 23, 12. 2016, 1111–1116.