

# ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗГИБНОЙ ДЕФОРМАЦИИ ПРОТОФИЛАМЕНТОВ ТУБУЛИНА ФОРМИРУЮЩИХ МИКРОТРУБОЧКИ В ЭУ- И ПРО-КАРИОТИЧЕСКИХ КЛЕТКАХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

**Федоров В.А., Холина Е.Г., Гудимчук Н.Б., Коваленко И.Б.**

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Биологический факультет, кафедра биофизики, Россия, 119992, г. Москва, Ленинские горы, 1-24

Микротрубочки выполняют множество функций в организме: от поддержания формы клетки и образования системы путей для внутриклеточного транспорта, до поиска, захвата и перемещения хромосом при клеточном делении. Сложное динамическое поведение микротрубочек, лежащее в основе их многофункциональности, на протяжении многих лет является предметом пристального изучения, однако многое остаётся неясным в конкретных механизмах, в частности, явления, известного под названием “динамическая нестабильность”. Микротрубочки способны стохастически переключаться между стадиями медленного роста и стремительной деполимеризации. Микротрубочки эукариот состоят, как правило, из 13 нитей-«протофиламентов», и долгое время считалось, что только эукариотическим организмам свойственно наличие полых цилиндрических структур, сформированных гетеродимерами глобулярных белков тубулинов из семейств  $\alpha$  и  $\beta$ , обладающих ГТФазной активностью. Не так давно в работах (Pilhofer et al., 2011; Deng et al., 2017) было показано, что бактериальные тубулины *VtubA* и *VtubB*, обнаруженные в бактериях рода *Prostheco bacter*, образуют в простеках этих бактерий структуры, подобные эукариотическим микротрубочкам. Эти структуры проявляют динамическое поведение, свойственное микротрубочками эукариот, и также демонстрируют динамическую нестабильность в экспериментах *in vitro*. В то же время, эти структуры гораздо меньше по размеру и состоят всего из 4-5 протофиламентов, что делает их удобными для изучения методами молекулярной динамики модельными объектами. Используя ранее разработанные подходы (Fedorov et al., 2019; Fedorov et al., 2024), мы исследовали конформационные изменения бактериальных микротрубочек. Благодаря их небольшому размеру можно моделировать целые бактериальные мини-микротрубочки, что может дать важные сведения о том, как молекулярные свойства тубулинов способствуют их спонтанной сборке и разборке.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-74-00002, <https://rscf.ru/project/24-74-00002/>