

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И КОНФОРМАЦИОННАЯ ПОДВИЖНОСТЬ ФИЛАМЕНТОВ БЕЛКОВ AtubA/B2 И FtsZ В АРХЕЯХ И БАКТЕРИЯХ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Вольхин И.А., Федоров В.А., Гудимчук Н.Б.¹, Коваленко И.Б.

Биологический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

¹Физический факультет, Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Тубулины – семейство белков цитоскелета, формирующих микротрубочки в эукариотических клетках. В последние годы методом криоэлектронной микроскопии получено большое число пространственных структур белковых филаментов бактериальных и архейных гомологов белков-тубулинов, в частности белков FtsZ бактерий [1] и недавно открытых белков AtubA/B архей [2]. Метод полноатомной молекулярной динамики ранее показал свою эффективность в выяснении механизмов конформационной подвижности и механических свойств протофиламентов белков-тубулинов эукариот [3]. В данном исследовании мы применяем методы анализа нормальных мод и полноатомной молекулярной динамики для изучения конформационной подвижности и механических свойств филаментов белков FtsZ из бактерии *Klebsiella pneumoniae* и белков AtubA/B2 из археи *Candidatus Lokiarchaeum ossiferum*. В ходе исследования было рассчитано изменение углов Эйлера во времени, характеризующее подвижность молекул белков в составе филаментов друг относительно друга, а также выявлены основные направления изгиба филаментов белков FtsZ и AtubA/B2. Результаты были сравнены с полученными ранее данными для эукариотических тубулиновых протофиламентов. Данное исследование проливает свет на происхождение цитоскелета и эволюцию механизмов динамики микротрубочек.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-44-01015, <https://rscf.ru/project/25-44-01015/>

1. Fujita J, Amesaka H, Yoshizawa T, Hibino K, Kamimura N, Kuroda N, Konishi T, Kato Y, Hara M, Inoue T, Namba K, Tanaka SI, Matsumura H. Structures of a FtsZ single protofilament and a double-helical tube in complex with a monobody. *Nat Commun.* 2023 Jul 10;14(1):4073. doi: 10.1038/s41467-023-39807-5. PMID: 37429870; PMCID: PMC10333351.

2. Wollweber F, Xu J, Ponce-Toledo RI, Marxer F, Rodrigues-Oliveira T, Pössnecker A, Luo ZH, Malit JLL, Kokhanovska A, Wiczorek M, Schleper C, Pilhofer M. Microtubules in Asgard archaea. *Cell.* 2025 May 1;188(9):2451-2464.e26. doi: 10.1016/j.cell.2025.02.027. Epub 2025 Mar 21. PMID: 40120574.

3. Fedorov VA, Orekhov PS, Kholina EG, Zhmurov AA, Ataulakhanov FI, Kovalenko IB, et al. (2019) Mechanical properties of tubulin intra- and inter-dimer interfaces and their implications for microtubule dynamic instability. *PLoS Comput Biol* 15(8): e1007327. <https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1007327>