

## АНАЛИЗ СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БАКТЕРИАЛЬНЫХ МИКРОТРУБОЧЕК МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

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 – один из трех основных типов филаментов цитоскелета. Они были охарактеризованы около 70 лет назад и на сегодняшний день обнаружены в клетках всех эукариот. Функции эукариотических микротрубочек очень разнообразны, и большинство из них микротрубочки выполняют благодаря своему необычному динамическому поведению. Тубулин относится к наиболее консервативным белкам эукариот. Сходство полных аминокислотных последовательностей для  $\alpha$ - и  $\beta$ - тубулина у человека и дрожжей достигает значений выше 80%. Предполагается, что основным фактором стабилизирующего отбора является способность к самопроизвольной сборке-разборке микротрубочек, т.е. динамическая нестабильность.

В 2002 г в бактериях рода *Prostecobacter* были обнаружены гены гомологов тубулинов со сходством аминокислотной последовательности их белковых продуктов до 37% по отношению к тубулинам эукариот (Jenkins et al., 2002). Белки были названы бактериальные тубулины А и В (VtubA, VtubB).

В дальнейшем было показано, что бактериальные тубулины VtubA и VtubB обладают большим сходством с эукариотическим тубулином, белки VtubA и VtubB образуют гетеродимер VtubAB, структура которого близка к строению гетеродимера  $\alpha\beta$ -тубулина эукариот (Schlieper et al., 2005). Таким образом, бактериальные тубулины VtubA и VtubB представляют собой альтернативный вариант организации протофиламентов в виде микротрубочек. Благодаря малому размеру бактериальных мини-микротрубочек, этот объект целиком доступен для молекулярно-динамического моделирования.

Нами были проведены расчеты молекулярной динамики модельной бактериальной микротрубочки (PDB ID: 5o09) и проведен анализ латеральных и лонгитудальных контактов молекул тубулина в теле микротрубочки и выявлены структурно-механические особенности бактериальных микротрубочек, которые необходимы для обеспечения динамической нестабильности. Эти свойства тубулинов в составе мини-микротрубочек, как мы предполагаем, должны быть присущи и тубулинам 13-протофиламентных эукариотических микротрубочек.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-74-00002 (<https://rscf.ru/project/24-74-00002/>)).