

Особенности образование нанокристаллических комплексов ДНК с белком SASP в бактериях *Bacillus Cereus*.

Научный руководитель – Крупянский Юрий Федорович

Зуйкова Анастасия Андреевна

Студент (бакалавр)

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Институт химии и проблем устойчивого развития (ИПУР), Кафедра ЮНЕСКО "Зелёная химия для устойчивого развития Новомосковск, Россия

E-mail: zuykova_a@list.ru

В природе существуют микроорганизмы способные выживать в неблагоприятных условиях, доказано что в таких условиях и них запускается универсальный механизм защиты ДНК нуклеоида при различных видах воздействия на бактерию, например, при голодании, окислительном и температурном стрессе или других видах стресса.

Нуклеоид, совместно со вспомогательными структурами, переходит из дисперсного состояния в конденсированное за счет образования упорядоченно организованных (кристаллических) комплексов ДНК с ДНК-стабилизирующими белками. Этот процесс, происходящий непосредственно внутри бактериальной клетки, носит название *in vivo* кристаллизации, или биокристаллизации[1].

Одним из видов бактерий которым свойственна биокристаллизация является *Bacillus cereus*. При попадании в организм человека *Bacillus cereus* вызывает острые кишечные инфекции. Известно, что переход в покоящееся состояние в этих клетках осуществляется при помощи кристаллизации нуклеоида небольшими по размерам ДНК-связывающими белками - малыми кислоторастворимыми белками SASP (Small Acid Soluble Proteins). Для определения молекулярных механизмов взаимодействия белка SASP с ДНК в нанокристаллах была проведена обработка результатов серии дифракционных экспериментов на базе Европейского центра синхротронного излучения ESRF (Гренобль, Франция) по изучению структурного ответа на стресс в спорообразующих бактериях *Bacillus cereus*, подверженных стрессу голодания. Для голодающих бактерий *Bacillus cereus* пик с периодом 45 ангстрем, видимо, связан с наличием нанокристаллических комплексов ДНК с белком SASP.

Изучены трёхмерные структуры белков SASP, находящиеся в базе данных белковых структур RCSB PDB. В базе данных отсутствует структура белка SASP бактерии *Bacillus cereus*. Построена трёхмерная структура белка SASP бактерии *Bacillus cereus* на основании моделирования по гомологии белка SASP *B. cereus* с белком SASP *Bacillus subtilis* (штамм 168) 2z3x.

Методом молекулярной динамики проведено изучение образования комплексов (нанокристаллов) ДНК с белком SASP на примере системы, состоящей из 12 белков SASP и 12 коротких двуцепочечных олигонуклеотидов. Показано, что образуются устойчивые комплексы SASP-ДНК. Получены энергетические характеристики и структура таких комплексов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (Тема 0082-2014-0001, № АААА-А17-117040610310-6).

Источники и литература

- 1) 1. Биокристаллические структуры в нуклеоидах стационарных и покоящихся клеток прокариот/ Н. Г. Лойко [и др.]// Микробиология. - 2017. - том 86. - № 6. - С. 703-719.