

## МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАСТИЧНОСТИ ДИМЕРОВ ГИСТОНОВ H3-H4

Поспелова Ю., Армеев Г.А., Шайтан А.К.

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Биологический ф-т,  
каф. Биоинженерии, Россия, Москва, 119991, Ленинские горы, д. 1, стр. 73, Тел.:  
+7(909)932-27-11, i.pospelova@intbio.org armeev@intbio.org alex@intbio.org

Нуклеосомы являются основными образующими элементами хроматина. Они состоят из гистоновых белков с участком молекулы ДНК и способствуют не только компактизации последней внутри ядра, но также играют важную роль в процессах транскрипции и репарации. Специальные белковые комплексы ремоделеры осуществляют перемещение и изменение состава нуклеосом. Недавно было показано, что гистоновый октамер претерпевает внутренние конформационные изменения, которые изменяют структуру всей нуклеосомы и позволяют ей взаимодействовать с различными белковыми комплексами, а также напрямую влияют на транслокацию ДНК [2]. В связи с этим актуальным является понимание внутренней динамики гистонического октамера, в частности димеров гистонов H3-H4, на молекулярном уровне. Такого рода пластичность с трудом изучается экспериментально, поэтому были использованы методы молекулярной динамики [1].

С использованием методов молекулярной динамики и молекулярного моделирования был решен ряд задач: 1) проведена молекулярная динамика полноатомных моделей димера H3-H4; 2) создана полноатомная модель нуклеосомы со сшивками между гистонами H3-H4; 3) изучено влияние дисульфидных сшивок на динамику димера гистонов H3-H4. Работа была выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова. Работа поддержана грантом РФФИ № 18-74-10006.

### Литература.

1. Shaytan A.K., Armeev G.A., et al. Coupling between Histone Conformations and DNA Geometry in Nucleosomes on a Microsecond Timescale: Atomistic Insights into Nucleosome Functions // Journal of Molecular Biology, 2016
2. Sinha K.K., Gross J.D., Narlikar G.J. Distortion of histone octamer core promotes nucleosome mobilization by a chromatin remodeler // Science, 2017
3. Bilokapic S., Strauss M., Halic M. Structural rearrangements of the histone octamer translocate DNA // Nature communications, 2018