

**Использование метода корреляционной молекулярной динамики для получения полноатомных моделей по данным криоэлектронной микроскопии**

**Научный руководитель – Ярошевич Игорь Александрович**

***Мамчур Александра Александровна***

*Студент (магистр)*

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

*E-mail: al.mam4ur@yandex.ru*

Современная криоэлектронная микроскопия (крио-ЭМ) позволяет получать структуры биомолекул в различных функциональных состояниях и с разрешением, близким к атомарному, которое ранее достигалось только с помощью рентгеновской кристаллографии. Однако методы интерпретации экспериментальных данных и получения точных полноатомных моделей из криоэлектронных карт отстают от этой революции в разрешении. Возникает необходимость внедрения новых методов.

Метод корреляционной молекулярной динамики (correlation-driven molecular dynamics, CDMD) позволяет автоматически сопоставить полноатомную модель белка с крио-ЭМ картой, используя для улучшения корреляции между ними химически точное силовое поле и термодинамическую выборку. Исследования [1] показывают, что CDMD справляется с задачей уточнения структуры в большинстве случаев лучше, чем другие широко используемые методы и программы (Phenix, Rosetta и др.). Применение CDMD позволяет избавиться от таких артефактов, возникающих в результате “ручного” построения моделей, как повороты ротомеров, выходящие за рамки карт Рамачандрана, неправильные длины и углы связей, атомные столкновения и др.

В данной работе метод CDMD используется для уточнения полноатомной структуры комплекса бактериального шаперонина GroEL и его кошаперонина GroES. Для молекулярно-динамических симуляций использовался программный пакет GROMACS 2020.1 с функцией Density fitting.

**Источники и литература**

- 1) Igaev M., Kutzner C., Bock L.V., Vaiana A.C., Grubmüller H. Automated cryo-EM structure refinement using correlation-driven molecular dynamics // Elife. 2019 Mar.