

ИЗМЕНЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ДВОЙНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СЛОЯ НА ПОВЕРХНОСТИ ФОСФОЛИПИДНОЙ МЕМБРАНЫ ПРИ ВАРИАЦИИ ЕГО ИОННОГО СОСТАВА

Нестеренко А.М., Красильников П.М.

Кафедра биофизики биологического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, 1, корпус 12, (495) 939-53-67

Поверхностные свойства клеточных мембран определяют разнообразные биологически важные процессы, такие, например, как слияние везикул, взаимодействие мембраны с белками и другими заряженными макромолекулами. Фосфолипидные БЛМ являются хорошей моделью клеточных мембран и всегда несут отрицательный заряд и формируют на поверхности двойной электрический слой (ДЭС). Теория Гуи-Чепмена-Штерна (ГЧШ), связывающая поверхностный заряд, адсорбцию ионов и их концентрации хорошо описывает мембранные системы в присутствии сильно и слабо адсорбирующихся катионов, например Be^{2+} и Na^+ . Наша работа посвящена исследованию структуры ДЭС и механизмов адсорбции ионов на фосфолипидных мембранах методами молекулярной динамики в полноатомном силовом поле OPLS. Очевидно, что как механизм адсорбции, так и распределение ионов в ДЭС зависит от их гидратации, причем необходимо учесть изменение свойств воды в ДЭС по сравнению с ее объемными свойствами [2, 1]. По нашим данным за геометрической границей мембраны диффузия воды достигает объемного значения только на расстояниях порядка 10 \AA . Это означает, что диффузная часть двойного электрического слоя расположена в слое воды с измененными свойствами. Для измерения электрического потенциала ионов мы использовали две методики: измерение потенциала электрического взаимодействия иона с окружением, U_{fei} (1) и измерение потенциала средней силы иона U_{pmf} (2):

$$U_{fei}(z) = U_{i,srf} + U_{i,atm} + U_{i,sol} \simeq \Delta H_{ion} \quad (1)$$

$$U_{pmf}(z) = kT \ln \frac{C_{ion}(z)}{C_{ion}(\infty)} \equiv \Delta G_{ion} \quad (2)$$

здесь энергии взаимодействия $U_{i,srf}$ — иона с поверхностью бислоя, $U_{i,atm}$ — с окружающими ионами, $U_{i,sol}$ — с водой, C_{ion} — локальная концентрация иона. Классическая модель ГЧШ предполагает равенство двух этих энергий. Мы продемонстрировали, что для анионов Cl^- они совпадают, тогда как для катионов Na^+ , K^+ — различаются вблизи поверхности. Ранее опубликованная работа [3] также обнаружила различие в поведении катионов и анионов в двойном электрическом слое: эффективное положение поверхности диффузного слоя было подобрано различным для соответствия профилей концентрации ионов уравнениям ГЧШ. Таким образом, по-видимому, поведение анионов вблизи заряженной поверхности БЛМ имеет классический вид, тогда как на поведение катионов определяется наряду с электростатикой, также энтропией растворителя.

Литература.

1. *Aman K. et al.* Biophys. J. 2003, 84(1), 102-115.
2. *Нестеренко А. и др.* Биологические мембраны. 2011, 28(5), стр. 397-407.
3. *Yi M. et al.* Phys.Rev.Let. 2008, 101(3), pp. 381031-381034.