

## ИССЛЕДОВАНИЕ КЛАСТЕРОВ В ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ МЕМБРАНАХ МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Пыркова Д.В., Тарасова Н.К., Ефремов Р.Г.

Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и  
Ю.А. Овчинникова РАН  
Россия, 117997, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 16/10  
Тел./факс: (495) 336-20-00  
E-mail: dpyrkova@gmail.com

Изучение свойств смешанных бислоев позволит лучше понять процессы, лежащие в основе образования и функционирования тех или иных биологических мембран и их взаимодействия с клеточными белками. Наряду с экспериментальными методами, применяемыми для исследования модельных систем, используют методы компьютерного моделирования. Одним из наиболее информативных среди них является метод молекулярной динамики (МД).

Природные мембраны имеют сложный липидный состав, в связи с чем, для исследования свойств липидных бислоев используют модельные мембраны. Они могут быть как однокомпонентными, так и многокомпонентными (смешанными).

В настоящей работе проведено исследование шести бислоев, в состав которых входили диолеилфосфатидилхолин (ДОФХ) и дипальмитоилфосфатидилхолин (ДПФХ). Из рассматриваемых систем две имеют в составе «чистые» ДОФХ и ДПФХ, и три имеют смешанный состав с 70%, 50%, 30% и 20% ДОФХ.

Для этих бислоев были проведены длительные расчеты МД (~15 нс) в полноатомном представлении при температуре 325 К.

В исследуемых системах были выявлены «кластеры» - более уплотненные участки. К кластерам были отнесены липиды, у которых атомы фосфора стабильно находились на расстоянии друг от друга, не превышающем  $r_{\text{cutoff}} = 0.6$  нм на последней нс траектории МД. Степень сольватация, и среднее число образуемых водородных связей с водой у липидов входящих в кластеры меньше чем у остальных липидов системы. Поверхность кластеров оказалась более гидрофильна, чем в среднем для бислоя. Толщина и профили плотности разных групп, для липидов входящих в кластеры и остальных липидов были одинаковыми.

Полученные данные, показывают, что сольватация, число водородных связей имеют обратно пропорциональную связь с долей гидрофильной поверхности. Это объясняется более плотным расположением головок в кластерах, и отсутствием участков со всплывшими ацильными цепями, отвечающими за гидрофобные участки поверхности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 07-04-01514-а, 09-04-13813-офи\_ц), программ РАН «Молекулярная и клеточная биология» и «Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов» и Федерального агентства по науке и инновациям в поддержку ведущих научных школ (грант НШ-4728.2006.4).