

## ВЛИЯНИЕ СООТНОШЕНИЯ ЛИПИДОВ С РАЗНЫМИ ГОЛОВКАМИ НА СВОЙСТВА БИСЛОЯ

Тарасова Н.К., Пыркова Д.В.<sup>1</sup>, Ефремов Р.Г.<sup>1</sup>

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
Биологический ф-т, каф. Биоинженерии; Россия, 119991, Москва, Ленинские горы;  
Телефон: (499) 977-23-38,  
E-mail: [nktarasova@gmail.com](mailto:nktarasova@gmail.com)

<sup>1</sup>Учреждение Российской академии наук Институт биоорганической химии  
им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова  
Россия, 117997, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 16/10

Фосфолипиды составляют основную долю липидов в мембране. Большая их часть представлена цвиттерионными фосфолипидами, в клетках животных преимущественно – фосфатидилхолином. Значительно меньший процент составляют анионные фосфолипиды, однако они играют большую роль в жизнедеятельности клетки. Соотношение анионных и цвиттерионных липидов, вероятно, может влиять на свойства мембраны, а значит, может быть одним из механизмов реализации клеткой своих функций. Соответственно, представляет интерес выявление влияния соотношения липидов с головками, имеющими различный суммарный заряд, на свойства бислоя.

Для исследования были выбраны следующие два типа фосфолипидов: диолеилфосфатидилхолин (ДОФХ) и диолеилфосфатидилсерин (ДОФС). При помощи метода молекулярной динамики (МД) было исследовано 9 модельных гидратированных бислоев, содержащих ДОФХ и ДОФС в разных соотношениях (100:0; 85:15; 70:30; 50:50; 30:70; 20:80; 15:85; 10:90 и 0:100). Расчеты МД (~15 нс) были проведены в полноатомном представлении при температуре 325 К с использованием программного пакета GROMACS v3.3.1. Были использованы параметры МД, выбранные на основании сравнения рассчитанных и экспериментально установленных физико-химических свойств однокомпонентных липидных бислоев.

Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы. Увеличение концентрации ДОФС оказывает влияние на геометрические параметры систем: толщина бислоя линейно увеличивается, а площадь на молекулу липида уменьшается. Это происходит за счет уменьшения подвижности липидов, то есть увеличения параметра порядка ацильных цепей. При этом меняются свойства поверхности бислоя. Число непосредственно связанных с головкой ДОФС молекул воды (индекс сольватации) увеличивается с возрастанием концентрации ДОФС и проходит через минимум в районе 20% ДОФС. Площадь гидрофильной части поверхности бислоя увеличивается за счет уменьшения площади ее «нейтральной» части.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и программ РАН «Молекулярная и клеточная биология» и «Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов».