

## **РОЛЬ ФОСФАТИДИЛХОЛИНА И ФОСФАТИДИЛСЕРИНА В ФОРМИРОВАНИИ СВОЙСТВ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ МЕМБРАН**

**Пыркова Д.В., Ефремов Р.Г.**

Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Россия, 117997, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 16/10, тел.: 8 (916) 074-43-65, E-mail: dpyrkova@gmail.com

Вычислительные технологии атомистического моделирования биомембран, позволяют существенно дополнить информацию, получаемую в экспериментах. Одним из таких подходов является метод молекулярной динамики (МД), часто применяемый для исследования модельных мембранных.

Физико-химические свойства бислоя обусловлены не только индивидуальными характеристиками липидов, входящих в его состав. Большое влияние также оказывают взаимодействия между компонентами мембраны - липидами, молекулами воды, ионами и т.д. При этом важную роль играют непосредственные соседи липидных молекул – так называемый эффекты локального окружения.

При анализе методом МД девяти водно-липидных систем с разными концентрациями цвиттерионного диолеилфосфатидилхолина (ДОФХ) и отрицательно заряженного диолеилфосфатидилсерина (ДОФС) наблюдали неоднородное распределение параметров порядка ацильных цепей липидов (SCD), и молекулярного гидрофобного потенциала (МГП) на поверхности мембраны. Несмотря на идентичность ацильных цепей липидов, значения SCD для ДОФХ заметно ниже, чем для ДОФС. Кроме того, значения SCD сильно варьируют и для молекул липидов одного типа. Даже при низких концентрациях ДОФС его неполярные цепи сохраняют высокие значения параметров порядка, формируя кластеры с более упорядоченными молекулами ДОФХ. При содержании ДОФС > 50% он оказывает упорядочивающее влияние на молекулы ДОФХ, «подстраивая» таким образом свое локальное окружение.

Подобная способность к адаптации позволяет молекулам ДОФС даже при низких концентрациях (т.е. в окружении молекул ДОФХ) сохранять свои структурные и динамические характеристики, близкие к таковым в однокомпонентном бислое ДОФС. Молекулы ДОФХ более подвержены влиянию окружения на структуру и свойства. Различия во взаимодействии липидов с окружением приводят к нелинейной зависимости параметров поверхности бислоя от их концентрации. Так, в исследуемых системах наблюдали резкое увеличение степени мозаичности гидрофобных/гидрофильных свойств поверхности при переходе от концентраций, при которых молекулы ДОФС изолированы друг от друга ( $\leq 20\%$ ), к системам, где начинают часто встречаться пары ДОФС-ДОФС ( $> 20\%$ ). Способность мембран «накапливать» ДОФС до определенной концентрации без заметных изменений интегральных характеристик бислоя позволяет им регулировать свои свойства лишь за счет незначительного варьирования липидного состава. Мы полагаем, что такая адаптационная гибкость мембран чрезвычайно важна при их связывании с белками, пептидами и другими молекулами.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 14-14-00871).*