

ИЗУЧЕНИЕ ДИНАМИКИ ЛИПИДНЫХ РАФТОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Боздаганян М.Е., Шайтан К.В.¹

ФГБУ ФНКЦ ФМБА России, 115682 Москва, Ореховый б-р, 28

¹МГУ имени М.В.Ломоносова, биологический ф-т, 119991, г. Москва, Ленинские горы,
1/73

Большое количество экспериментов указывает на то, что в мембране есть наноразмерные области, обогащенные сфингомиелином и холестерином - «рафты» (от англ. raft – плот), которые играют важную роль в функциональной активности клетки: мембранного транспорта, передачи сигнала, регуляции активности мембранных белков и т.д.

Целью настоящей работы было исследование формирования и структуры рафта методом молекулярной динамики (МД) с использованием программного пакета GRO-MACS (в тяжелоатомном приближении) из трех липидов: пальмитоилолеоилфосфатидилхолина (ПОФХ), холестерина (ХОЛ) и сфингомиелина (СМ). Для расчета свободной энергии взаимодействия липидов использовался метод метадинамики. Основное внимание было уделено таким характеристикам рафта как размер, толщина, коэффициенты диффузии, параметры порядка ацильных цепей.

В результате проведенной работы были сделаны следующие выводы:

1. Молекулы холестерина играют главную роль в формировании и поддержании стабильности рафта, взаимодействуя с молекулами сфингомиелина (т.н. «зонтичный эффект»). Это подтверждается также результатами расчетов свободной энергии пар липидов между собой.

2. Липиды в рафте имеют фазу L_o. За формирование кристаллической структуры отвечают молекулы сфингомиелина.

3. Данные, полученные из МД, хорошо согласуются с экспериментальными данными: в частности, совпадает толщина мембраны и коэффициенты диффузии липидов.

4. Рафт – стабильная структура мембраны, не нарушающая ее целостности, со временем жизни не менее 0,3 мкс.