

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА СМЕШАННЫХ ЛИПИДНЫХ БИСЛОЕВ НА ПРИМЕРЕ СИСТЕМЫ ДОФХ/ДПФХ

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, 16/10
Тел./факс: (495) 336-20-00
E-mail: pyrkova@gmail.com

Природные мембраны имеют сложный липидный состав, в связи с чем для исследования свойств липидных бислоев создают модельные мембраны. Они могут быть как однокомпонентными, так и многокомпонентными (смешанными). Изучение свойств смешанных бислоев позволит лучше понять процессы, лежащие в основе образования и функционирования тех или иных биологических мембран.

Наряду с экспериментальными методами, применяемыми для исследования модельных систем, используют методы компьютерного моделирования. Среди них методы молекулярной динамики и Монте-Карло.

В настоящее время существует много работ по моделированию липидных бислоев, однако в них рассматривают, как правило, системы только с одним типом липидов. В последнее время все больше работ посвящено анализу смешанных систем. В основном это работы, изучающие образование «рафтов» в системах фосфолипид-холестерол. Значительно меньше данных получено для смешанным бислоев из различных фосфолипидов.

В настоящей работе проведено исследование пяти 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% и 20% ДОФХ.

Для этих бислоев были проведены длительные расчеты МД (~15 нс) в полноатомном представлении. Получены данные по структурным параметрам, гидратации и водородным связям представленных бислоев. Толщина смешанных бислоев больше, чем чистых. Число молекул воды на липид в смешанных бислоях принимает промежуточные значения по сравнению с однокомпонентными. Распределение углов наклона головок для ДОФХ и ДПФХ в одном бислое одинаковое. Процентное соотношение водородных связей, образующихся между водой и атомами кислорода, относящимися к фосфатной группе, и к группе глицерола, для ДОФХ и ДПФХ имеет одинаковый характер. Эти данные показывают, что смешение липидов с различными ацильными цепями оказывает влияние на такие параметры, характеризующие область интерфейса, как гидратацию и распределение водородных связей.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 06-04-49194-а, 07-04-01514-а), Федерального агентства РФ по науке и инновациям (грант «Ведущие научные школы» № 4728.2006.4) и РАН (программа «Молекулярная и клеточная биология»).