

# ИЗУЧЕНИЕ ДИНАМИКИ ЛИПИДНЫХ РАФТОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Боздаганян М.Е., Коваленко И.Б.<sup>1</sup>, Шайтан К.В.<sup>1</sup>

Федеральный научно-клинический центр специализированных видов медицинской помощи и медицинских технологий ФМБА России, 115682, Москва, Ореховый бульвар, 28, m.bozdaganyaun@gmail.com

<sup>1</sup>Биологический факультет Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, 1 корп.12

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 GROMACS (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 липидов в плоскости мембраны, параметры порядка ацильных цепей в рафтовой и нерафтовой областях.

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  $L_0$ . 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.