

ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОТРУБОК С ЛИПИДНЫМИ МЕМБРАНАМИ IN SILICO

Гончарова А.С., Орехов Ф.С.

Московский физико-технический институт (государственный университет),
Лаборатория компьютерного и математического моделирования биологических систем,
Россия, 141701, г. Долгопрудный, Институтский пер. 9

Стремительное развитие и распространение наноматериалов даёт потенциал для их прикладного применения в задачах медицины. Активно изучается вопрос целесообразности использования наночастиц и нанотрубок в качестве векторов-доставщиков различных веществ внутрь клетки. Компьютерное моделирование позволило определить различия в характере проникновения различных типов нанотрубок в липидный бислой [1], а также в характере взаимодействий наночастиц с липидными мембранами в зависимости от их фазы [2]: жидко-упорядоченной – L_o (от англ. “liquid ordered”) или жидко-неупорядоченной – L_d (от англ. “liquid disordered”), отличающихся степенью упорядоченности углеводородных цепей липидов, площадью, приходящейся на липид, и коэффициентом латеральной диффузии компонентов мембраны [3].

Данная работа посвящена изучению строения липидных бислоев и особенностей проникновения нанотрубок внутрь мембран методом компьютерного моделирования молекулярной динамики. В работе использовалось крупнозернистое силовое поле MARTINI. Для моделирования L_o и L_d фаз рассматривались однокомпонентные липидные бислои DPPC с различным ионным окружением (Na^+ и Cl^- / Ca^{2+} и Cl^-), а также двухкомпонентные мембраны, состоящие из липидов POPC и POPE с 0 mol%, 30 mol% и 50 mol% содержанием холестерина, и трехкомпонентная мембрана, состоящая из DPPC, холестерина и сфингомелина в соотношении 2:1:1. Для данных систем был проведен анализ ключевых параметров, характеризующих фазу липидов, а также проведены моделирования процесса взаимодействия с ними углеродных нанотрубок.

Литература

1. Baoukina S., Monticelli L., and Tieleman D.P., “Interaction of pristine and functionalized carbon nanotubes with lipid membranes” // J. Phys. Chem. B, 2013. V. 117, N. 40. P. 12113– 12123.
2. Sastre J. and Mannelli I. and Reigada R. Effects of fullerene on lipid bilayers displaying different liquid ordering: a coarse-grained molecular dynamics study” // BBA – General Subjects, 2017.
3. Рубин А.Б. Биофизика. Т. 2. Биофизика клеточных процессов. Биофизика мембранных процессов. М.: Издательство МГУ, 2004. 944 с.