

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДИЭТИЛСУЛЬФОКСИДА С ФОСФАТИДИЛХОЛИНОВЫМИ МЕМБРАНАМИ ПО ДАННЫМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЙЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

Горшкова Ю.Е., Душанов Э.Б.¹

Лаборатория нейтронной физики, ОИЯИ, Россия, 141980, г. Дубна, ул. Жолио Кюри 6,
+7(496) 216 27 74, gorshk@nf.jinr.ru

¹Лаборатория радиационной биологии, ОИЯИ, Россия, 141980, г. Дубна, ул. Жолио
Кюри 6, +7(496) 216 21 19, dushanov@jinr.ru

Липидный бислой, основную часть которого составляют молекулы фосфатидилхолина (ФХ), является структурной основой биологических мембран. Липидные бислой является полупроницаемым барьером при транспортировке через него различных молекул: маленькие не заряженные молекулы легко проникают во внутриклеточное пространство, в то время как для транспортировки больших или заряженных молекул (ионы, сахара и аминокислоты) требуются активные механизмы для быстрого достижения осмотического баланса через плазматические мембраны в ответ на быстрые изменения различных физических и/или химических параметров. Одним из таких механизмов является контролируемое слияние клеток в присутствии агентов слияния, в частности сульфоксидов.

Диэтилсульфоксид (ДЭСО) представляет собой амфифильную молекулу, состоящую из гидрофильной сульфоксидной группы и двух гидрофобных групп $\text{CH}_2\text{-CH}_3$. Исследования методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) показало, что ДЭСО достаточно сильно взаимодействует с полярной частью ФХ молекул, вызывая уменьшение толщины липидного бислоя с увеличением концентрации сульфоксида. Кроме того, в присутствии ДЭСО наблюдается слияние ФХ мембран. Однако метод МУРН не позволил однозначно ответить на вопрос: каков механизм взаимодействия молекул ДЭСО с молекулами ФХ.

С этой целью были проведены расчеты с помощью молекулярной динамики (МД). Модельная структура 1,2-димиристоил-*sn*-глицеро-3-фосфатидилхолина (ДМФХ) с 128 липидными молекулами получена из CHARMM-GUI [4]. Растворы ДЭСО-вода были добавлены в соотношениях 1:8 и 1:4. Анализ данных проведен инструментами пакета GROMACS 5.0.4 [5]. Полученные результаты по изменению толщины бислоя, взаимодействию и упорядочиванию сульфоксидов вокруг липидных молекул сравниваются с данными МУРН. Обсуждаются перспективы комплементарного использования МД и МУРН для исследования комплексных биологических систем.

Литература

1. Jo S., Kim T., Iyer V.G., Im W. // *J Comput Chem.* **29(11)**, 2008. 1859-65.
2. Van Der Spoel D., Lindahl E., Hess B., Groenhof G., Mark A.E., Berendsen H.J. // *J Comput Chem.* **26 (16)**, 2005. 1701-18.