

# СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЛИПИДНЫХ МОНОСЛОЕВ DMPS ПРИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ, ИССЛЕДОВАННЫЕ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ

Хомич Д.А., Нестеренко А.М.<sup>1</sup>, Волков Ю.А.<sup>2</sup>, Асадчиков В.Е.<sup>2</sup>, Тихонов А.М.<sup>3</sup>,  
Ермаков Ю.А.<sup>4</sup>

МГУ им. М.В. Ломоносова, Биологический факультет, каф. биофизики;  
siferosu@gmail.com

<sup>1</sup>НИИ ФХБ им. А.Н.Белозерского МГУ

<sup>2</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

<sup>3</sup>Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН

<sup>4</sup>ИФХЭ им. А.Н.Фрумкина РАН

Молекулы фосфолипидов, оказываясь на границе раздела фаз, формируют двумерную пленку (ленгмюровский монослой). В процессе латерального сжатия повышается поверхностное давление и происходит фазовый переход монослоя из состояния двумерной жидкости в гелевую (жидкокристаллическую) фазу. В данном исследовании были сконструированы и проанализированы монослои димиристоилфосфатидилсерина (DMPS) на поверхности водного раствора электролита (100 мМ KCL), для чего были использованы теоретический метод молекулярной динамики (MD) и экспериментальный метод рентгеновской рефлектометрии (XRR). Метод MD активно используется для моделирования липидных монослоев в аналогичных исследованиях, однако для получения наиболее точных данных требуется параллельное использование методов прямых наблюдений структурных параметров. MD расчеты проводилась в полноатомном силовом поле CHARMM36, с использованием программного пакета GROMACS. В экспериментах и расчетах были использованы системы с фиксированной площадью на липид, точки были выбраны по диаграмме сжатия.

Анализ кривых отражения проводился в предположении, что монослой содержит два суб-слоя, что позволило восстановить профиль электронной плотности монослоя. Этот профиль хорошо согласуется с профилем, полученным в MD. Кроме того, MD демонстрирует, что один суб-слой соответствует области липидных хвостов, а второй соответствует полярной области, содержащей связанные молекулы воды. MD визуализация системы демонстрирует переход липидной фазы в кристаллическое состояние в результате упорядочения углеводородных хвостов, тогда как толщина полярной области DMPS остается практически неизменной. Суммарная толщина монослоя увеличилась с  $20 \pm 3$  до  $28 \pm 2$  Å в жидком и твердом состояниях соответственно. При этом процессе гидратация полярных групп уменьшается как минимум в два раза. При анализе данных MD выяснилось, что толщина монослоя в жидкой фазе составляет около 25 Å в твердой - 30 Å. Зависимость полного потенциала системы от площади на липид, полученная из MD, также качественно совпала с аналогичной зависимостью, полученной методом ленгмюровского монослоя (LM). Хорошее согласие между данными метода MD, XRR и LM позволяет нам сопоставлять изменения потенциала Вольта с определенными молекулярными структурами.