

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПЕПТИДА A β (25-35) С ФОСФОЛИПИДНЫМИ БИСЛОЯМИ DMPC/DMPS

Айриян А.С.^{1,2}, Бадреева Д.Р.^{1,3}, Кучерка Н.^{4,5}

¹Лаборатория информационных технологий, Объединенный институт ядерных исследований, Россия, 141980, Дубна, ул. Жолио Кюри, 6

²Отдел вычислительной физики и ИТ, Национальная научная лаборатория

им. А. Алиханяна, Армения, 0036, Ереван, ул. братьев Алиханян, 2, ayriyan@jinr.ru

³Кафедра системного анализа и управления, Университет Дубна, Россия, 141980, Дубна, ул. Университетская, 19, badreeva@jinr.ru

⁴Лаборатория нейтронной физики, Объединенный институт ядерных исследований, Россия, 141980, Дубна, ул. Жолио Кюри, 6

⁵Кафедра физической химии лекарств, Фармацевтический факультет, Университет им. Я.А. Коменского, Словакия, Братислава, 832 32, kucerka@nf.jinr.ru

В настоящее время существует предположение о ключевой роли пептида бета-амилоида (A β 42) в возникновении болезни Альцгеймера. Считается, что его взаимодействие с клеточными мембранами вызывает нарушение их проницаемости и целостности, что, возможно, запускает дальнейшие нейродегенеративные процессы.

Известно, что фрагмент 25-35 бета-амилоида, являющийся его функциональным участком, имеет такие же нейротоксические свойства, что и целый пептид. Вследствие чего в данной работе для описания процесса встраивания бета-амилоида в клеточные мембраны было выполнено моделирование взаимодействия бета-амилоида 25-35 с цвиттер-ионными и анионными фосфолипидными бислоями, сконструированными из чистого DMPC и смеси DMPC+DMPS (2%, 3%), с помощью метода молекулярной динамики в программном пакете GROMACS 2019.3 [1]. Также было изучено влияние позиции введения пептида на такие параметры, как площадь на липид, толщина и параметр порядка. Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными МУНР. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-72-20186).

Литература.

1. Abraham M. J., Murtola T., Schulz R., S.d Páll S.d, Smith J. C., Hess B., Lindahl E. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers // *SoftwareX* v. 1–2, 2015. P. 19-25.