

## ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КАТИОННЫХ АНТИСЕПТИКОВ С ШЕРОХОВАТОЙ ЛИПОПОЛИСАХАРИДНОЙ МЕМБРАНОЙ *PSEUDOMONAS AERUGINOSA*

Холина Е.Г.<sup>1,2</sup>, Орехов Ф.С.<sup>1</sup>, Коваленко И.Б.<sup>1,2</sup>, Боздаганян М.Е.<sup>1</sup>, Страховская М.Г.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, 119992, г. Москва, Ленинские горы, 1 стр. 24

<sup>2</sup>Федеральный научно-клинический центр специализированных видов медицинской помощи и медицинских технологий ФМБА России, 115682, г. Москва, Ореховый бульвар, 28

Одними из наиболее устойчивых к катионным биоцидам являются грамотрицательные бактерии, особенно *Pseudomonas aeruginosa* – повсеместно распространенный вид, способный выживать в различных условиях окружающей среды и обладающий множественными защитными механизмами. *P. aeruginosa* обладает сложной клеточной стенкой, в состав которой входят как липополисахариды (ЛПС) с антигенными цепями, так и без антигенных цепей.

На основе расчета полноатомной молекулярной динамики, проведенного в течение микросекунды для модели шероховатой ЛПС мембраны без антигенных цепей в силовом поле CHARMM36 нами была создана ее такой мембраны было показано, что катионные антисептики не проникают во внутреннюю коровую часть. В молекулярно-динамических расчетах длительностью 5 микросекунд показано, что представители бигуанидов, СНЛ и пиклоксидин (РІС), сорбируются на поверхности внешней коровой части в виде ковра. В отличие от бигуанидов молекулы МІR сорбировались на поверхности ЛПС мембраны в виде мицеллярного агрегата. В результате сорбции антисептиков замедлялась диффузия молекул ЛПС практически на порядок. Поскольку антисептики не проникали внутрь коровой части, их присутствие не влияло на площадь, приходящуюся на молекулу ЛПС, на толщину бислоя и параметры порядка жирных кислот в составе молекул ЛПС.

Изучение взаимодействия катионных антисептиков различной химической природы с модельной шероховатой ЛПС мембраной *P. aeruginosa* является важным для понимания роли состава ЛПС мембран в обеспечении защитного барьера бактериальной клетки и вносит вклад в формирование представлений о механизмах бактерицидного действия антисептиков.