

## ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МЕХАНИЗМОВ АДсорБЦИИ ИОНОВ НА ЛИПИДНЫХ МЕМБРАНАХ

Хомич Д.А., Нестеренко А.М.<sup>1</sup>, Ермаков Ю.А.<sup>2</sup>

Биологический факультет Московского государственного университета, 119991, Москва  
ГСП1, Ленинские горы. E-mail: siferosu@gmail.com

<sup>1</sup>НИИФХБ им. А.Н. Белозерского МГУ, 119992, Москва, Ленинские горы, дом 1, стр 40

<sup>2</sup>ИФХЭ им. А.Н. Фрумкина РАН, 119071, Москва, Ленинский проспект, 31, корп. 4

Биологические мембраны – одни из важнейших функциональных компонентов живой клетки и участвует в клеточном метаболизме. Липидный матрикс биомембран является активным участником биохимических процессов, для нормального протекания которых мембранные белки должны изменять конформацию. В частности, было продемонстрировано обратимое блокирование механочувствительных каналов *Escherichia coli*, встроенных в липидные мембраны, многовалентными катионами (гадолиний, бериллий) [1].

Уже проделанные исследования [2, 3] свидетельствуют о регуляторной функции липидной фракции мембран, которая определяется ее составом и физико-химическими характеристиками. Одними из важнейших характеристик являются процентное содержание отрицательно заряженного липида и адсорбированные на поверхность ионы электролита. Так как межклеточное пространство и внутриклеточный матрикс представляет собой раствор многокомпонентного электролита, важно знать, каким образом происходит адсорбция ионов на мембрану. Один из наиболее удобных и точных методов исследования данного процесса – метод молекулярной динамики.

Наша работа посвящена исследованию молекулярных механизмов адсорбции ионов с помощью метода полноатомной молекулярной динамики в силовом поле Slipids.

Мембраны собраны из липидов двух сортов: фосфатидилэтаноламина (PE) и фосфатидилглицерола (PG), так как эти липиды преимущественно составляют бактериальные мембраны и широко используются в качестве модельных систем. Серия расчетов проводится на мембранах из POPE и POPG: 20% POPG, 40% POPG, 60% POPG. Электролиты: NaCl, KCl, BeCl<sub>2</sub> с ионными силами 50, 120 и 200 mM. Результаты расчетов сопоставлены с теорией Гуи Чепмена Штерна, и экспериментальными данными, а также аналогичной работой в силовом поле OPLS.

### Литература.

1. Ermakov Yu.A., Kamaraju K., Sengupta K., Sukharev S.I. 2010. Gadolinium ions block mechanosensitive channels by altering the packing and lateral pressure of an ionic lipids. *Biophys. J.* 98 (6), 1018–1027.
2. Membrane phosphatidylserine regulates surface charge and protein localization. / Tony Yeung, Gary E Gilbert, Jialan Shi et al. // *Science* (New York, N.Y.). — 2008. — January. — Vol. 319, no. 5860. — P. 210–3.
3. Goldenberg N. M., Steinberg B. E. Surface charge: a key determinant of protein localization and function. // *Cancer research*. — 2010. — March. — Vol. 70, no. 4. — P. 1277–80.