

СОЗДАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ОПИСАНИЯ АДсорбЦИИ ПОЛИЛИЗИНА НА ЛИПИДНЫЕ МЕМБРАНЫ НА ОСНОВЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ И МОДЕЛИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Хомич Д.А., Нестеренко А.М.¹, Молотковский Р.Ю.², Галимзянов Т.Р.²,
Ермаков Ю.А.²

Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта Российской академии наук,
Москва siferosu@gmail.com

¹Институт Физико-Химической биологии имени А.Н. Белозерского МГУ им. М.В.
Ломоносова, Москва

²Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии
наук, Москва

Ранее было показано, что адсорбция различных катионов приводит к изменению граничного потенциала мембраны и сама по себе происходит неравномерно, демонстрируя нетривиальную зависимость как от содержания отрицательно заряженного липида, так и от длины поликатионов [1]. В ходе нашего исследования мы проводили электрокинетические измерения на суспензиях липосом, состоящих из нейтральных (фосфатидилхолин, ФХ) и анионных (кардиолипид, КЛ) фосфолипидов в определенных пропорциях. В ходе исследования мы добавляли к суспензии липосом фиксированного состава молекулы α -поли-L-лизина (ПЛ).

Для описания наблюдаемых экспериментальных феноменов мы привлекли также методы молекулярного моделирования и молекулярной динамики (МД). Для количественного анализа таких характеристик адсорбционного слоя ПЛ как латеральное распределение и геометрия липид-полимерных кластеров и их влияние на положение плоскости скольжения, а также распределение электрического потенциала вблизи поверхности мембраны. Методы МД успешно применялись нами ранее для оценки зависимости зета-потенциала от концентрации адсорбирующихся катионов [2].

Два варианта теоретической модели использовались для описания экспериментальных данных: без и с учетом геометрии адсорбции. В варианте без учета геометрии (Г-0) мы предполагали, что полимер изменяет поверхностный заряд мембраны на величину, равную количеству адсорбированных мономеров ПЛ. В варианте модели, учитывающей геометрию системы (Г-1), мы опирались на разработанную ранее модель полимерных кластеров [3].

Литература.

1. Finogenova O.A., et al. // Biochem. Suppl. Ser. A Membr. Cell Biol., 2008. Vol. 2, № 2. P. 181–188.
2. Khomich D.A. et al. // J. Phys. Conf. Ser. 2017. Vol. 794. P. 012010.
3. Molotkovsky R.J., et. al. // Colloid Journal. 2019. Vol. 81. P. 125-1355