

Латеральная гетерогенность биологических мембран ДОФХ/ДОФС: данные компьютерного моделирования

Научный руководитель – Ефремов Роман Гербертович

Веретененко Ирина Ивановна

Студент (бакалавр)

Московский физико-технический институт, Москва, Россия

E-mail: veretenenko.ii@phystech.edu

Физико-химические характеристики биологических мембран во многом определяются их липидным составом. Известно, что фосфолипиды образуют в плоскости мембраны скопления - кластеры [2, 3], приводящие к гетерогенности свойств бислоя. В данной работе с помощью молекулярно-динамического моделирования [1] исследовали кластеризацию липидов в двухкомпонентных мембранах с различным соотношением цвиттер-ионного диолеилфосфатидилхолина (ДОФХ) и отрицательно заряженного диолеилфосфатидилсерина (ДОФС).

В настоящее время не существует единого подхода к определению параметров кластеризации липидов в бислое. В данной работе предложен метод, основанный на оценке локальной поверхностной плотности бислоя в окрестности полярных головок липидов: липид называли «кластеризованным», если плотность атомов других липидов вокруг центра масс его головки превышала среднюю плотность системы.

Для изучения динамических свойств липидов модельные системы сравнивались по следующим характеристикам: средняя плотность системы, коэффициент диффузии липидов в плоскости монослоя и время жизни кластеризованного состояния. С увеличением доли ДОФС средняя поверхностная плотность системы росла от 0.287 ± 0.004 атомов/Å² для однокомпонентного ДОФХ до 0.305 ± 0.004 атомов/Å² для ДОФС. Кластеризованные липиды двигались медленнее некластеризованных: соответствующие коэффициенты диффузии уменьшались с увеличением доли ДОФС в диапазоне 17-10 мкм²/с и 25-17 мкм²/с. Времена жизни кластеризованного состояния, рассчитанные с помощью корреляционной функции, увеличивались с концентрацией ДОФС в диапазоне 1.4-3.9 нс для липидов ДОФХ и 3.3-9.1 нс - для ДОФС.

Различия в свойствах рассмотренных систем могут быть объяснены тем, что, благодаря наличию дополнительных донорной аминокислотной группы и акцепторной карбоксильной группы, ДОФС может образовывать больше водородных связей различных типов: липид-липид и липид-вода-липид (т.н. «водные мостики»), что с ростом концентрации ДОФС приводит к образованию более плотного и менее динамичного бислоя.

Работа поддержана грантом РФФИ 18-14-00375.

Источники и литература

- 1) Abraham M.J., Teemu Murtola, Schulz R., Páll S., Smith J.C., Hess B., Lindahl E. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers // SoftwareX 2015. V. 1–2. P. 19
- 2) Klauda J.B., Brooks B.R., Pastor R.W., Dynamical Motions of Lipids and a Finite Size Effect in Simulations of Bilayers // J Chem Phys. 2006. V. 125(14).
- 3) Pyrkova D.V., Tarasova N.K., Krylov N.A., Nolde D.E., Pentkovsky V.M., Efremov R.G. Dynamic clustering of lipids in hydrated two-component membranes: results of computer modeling and putative biological impact // Journal of Biomolecular Structure and Dynamics 2013. V. 31:1. P. 87