

ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМОВ АДСОРБЦИИ КАТИОНОВ Na^+ НА ЛИПИДНЫЕ МЕМБРАНЫ НА МОЛЕКУЛЯРНОМ УРОВНЕ

Хомич Д.А., Нестеренко А.М., Ермаков Ю.А.

Биологический факультет Московского государственного университета, 119991, Москва
ГСП1, Ленинские горы. E-mail: siferosu@gmail.com НИИФХБ им. А.Н. Белозерского
МГУ, 119992, Москва, Ленинские горы, дом 1, стр 40 ИФХЭ им. А.Н. Фрумкина РАН,
119071, Москва, Ленинский проспект, 31, корп. 4

Биологическая мембрана - важная для клетки структура. Она участвует в клеточном метаболизме и обладает регуляторной функцией [2], которая зависит от состава липидной фракции мембраны и её физико-химических характеристик, таких как процентное содержание заряженных липидов, количество адсорбированных из окружающей среды ионов, распределение электрического потенциала на границе раздела мембрана-водный раствор. Так как межклеточное пространство и внутриклеточный матрикс содержат множество ионов, адсорбция их на поверхность мембран происходит постоянно, и этот процесс может вносить весомый вклад в функционирование клетки [1].

Исследование процессов адсорбции на молекулярном уровне можно осуществить с помощью метода молекулярной динамики. В качестве модельных систем использовались бислойные мембраны состоящие из фосфатидилэтаноламина (PE) и фосфатидилглицерола (PG), композиционно близкие к мембранам прокариот.

Расчеты молекулярной динамики производились с помощью пакета GROMACS в полноатомном силовом поле Slipids с явно заданным растворителем. Для вычислений использовался суперкомпьютер “Ломоносов” СКЦ НИВЦ МГУ.

Серия расчетов проведена на бислойных мембранах из POPE и POPG с различным процентным содержанием анионного липида (POPG): 20%, 40%, 60%, при двух температурах: 303 К и 340 К, в присутствии NaCl различной концентрации.

В результате анализа серии вычислительных экспериментов были получены распределения поверхностных потенциалов модельных систем. Зависимость потенциала от ионной силы оценивалась в рамках теории Гуи-Чепмена-Штерна, что позволило определить параметры связывания катионов — константу связывания (K) и плотность центров связывания (Q) при разных температурах. При температуре 303К $K \approx 2 \text{ M}^{-1}$, $Q \approx -17 \text{ мКл/см}^2$; при температуре 340К $K \approx 7.15 \text{ M}^{-1}$, $Q \approx -25.49 \text{ мКл/см}^2$. Используя полученные при разных температурах константы связывания можно заключить, что процесс адсорбции является экзотермическим, реакция имеет энтропийное направление.

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. Goldenberg N. M., Steinberg B. E. (2010) Surface charge: a key determinant of protein localization and function. *Cancer res.* 70 (4), 1277–80.