

ПОДВИЖНОСТЬ ИОНОВ В ПРИМЕМБРАННОМ СЛОЕ ВОДЫ

Нестеренко А.М., Красильников П.М.

МГУ им. М.В. Ломоносова, кафедра биофизики, группа ERG,
Россия, 119992, Москва, Воробьевы горы, д. 1, стр. 12.
+7 (919) 7260868 comcon1@erg.biophys.msu.ru

Свойство повышенной проводимости протона энергезированных биологических мембран играет важную роль в эффективной работе энергетических органелл клетки, то есть митохондрий и хлоропластов. Скорость синтеза клеточного энергетического эквивалента АТФ определяется скоростью утилизации трансмембранного протонного градиента АТФазой, которая, в свою очередь, определяется скоростью диффузии протонов от $\Delta\mu\text{H}$ -генераторов к АТФазе.

Нам удалось продемонстрировать в *in silico* эксперименте, почему, во-первых, протон не покидает мембранной поверхности и, во-вторых, почему скорость его латеральной компоненты диффузии выше чем скорость нормальной. Оказывается, что для обеспечения высокой латеральной диффузии протонов наружная поверхность мембраны должна удовлетворять некоторым условиям. Наиболее важным оказывается условие образование в примембранном (ПМ) водном слое множество стабильных Н-связей.

Мы разработали ряд методов на основе расчетов молекулярной динамики бислойных мембран, которые позволяют оценивать их латеральную ионную проводимость. Наши данные о проводимости мембран хорошо согласуются с экспериментальными. На примере трёх систем: льда 1h, жидкой воды и ПМ воды – мы установили, что релаксация существенно ингибирует перенос протона. Барьер переноса протона на соседнее положение после релаксации оказывается равным 3 ккал/моль.

Мембраны с повышенной протонной проводимостью как раз являются необходимой составляющей PEMFC (водородной топливной ячейки). Также такие мембраны используются в экспериментах с искусственным фотосинтезом – это другая перспективная область в мировой энергетике. Методы *in silico* оценки ионной проводимости произвольной мембраны позволят предсказать химический состав мембраны, обладающей наилучшей проводимостью.