

## ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ ВНЕШНЕЙ МЕМБРАНЫ КЛЕТОЧНОЙ СТЕНКИ МУТАНТНОЙ ФОРМЫ ГРАМ-ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ БАКТЕРИИ *SALMONELLA*

Холина Е.Г.<sup>1</sup>, Нестеренко А.М.<sup>1</sup>, Зленко Д.В.<sup>1</sup>, Коваленко И.Б.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
Биологический ф-т, каф. Биофизики,  
Россия, 119234, Москва, Ленинские горы, 1 стр. 24

<sup>2</sup>ФГБУ ФНКЦ ФМБА России, 115682 Москва, Ореховый б-р, 28  
Тел.: +7(495)939-02-89; факс: +7(495)939-11-16;  
E-mail: tenarra@mail.ru

В состав клеточных стенок грам-отрицательных бактерий входят липополисахариды (ЛПС), которые являются причиной сепсиса и инфекционных заболеваний бактериальной природы. Поиск эффективных антимикробных соединений, которые связываются непосредственно с ЛПС клеточных стенок грам-отрицательных бактерий, невозможен без понимания устройства внешних клеточных мембран грам-отрицательных бактерий, состоящих из молекул ЛПС.

Центральная (коровая) часть ЛПС характеризуется консервативной структурой, поэтому целесообразным является изучение механизмов взаимодействия антимикробных агентов именно с этой частью молекулы. Мы исследовали Re мутантный штамм бактерии *Salmonella*, обладающий минимальной ЛПС структурой, необходимой для выживания бактериальной клетки. Re мутант представляет собой штамм бактерии с укороченными молекулами ЛПС, состоящими только из липида А и коровой части. Нами были охарактеризованы масс-спектры ЛПС Re мутанта и установлена его точная молекулярная структура.

На основе охарактеризованной нами структуры была создана молекулярно-динамическая модель наружной мембраны клеточной стенки мутантного штамма бактерии *Salmonella* и проведено исследование ее свойств методами компьютерного моделирования. Созданная асимметричная мембрана состояла из монослоя ЛПС Re-мутанта и фосфолипидного монослоя. Методами молекулярной динамики были охарактеризованы основные свойства составляющих ее монослоев, а именно: площадь поверхности мембраны, приходящаяся на одну молекулу ЛПС и фосфолипида, сила поверхностного натяжения. Для изучения свойств созданной мембраны были оценены толщина гидрофобной части, площадь, приходящаяся на липид, также была охарактеризована подвижность липидов. Для расчетов взаимодействия методом молекулярной динамики использовали пакет GROMACS.

На основе созданной мембраны в дальнейшем будет изучено взаимодействие с созданной нами ранее моделью антимикробного вещества, октакатионного фталоцианина цинка, и станет возможной интерпретация экспериментальных данных по сорбции октакатионного фталоцианина цинка на клеточных стенках грам-отрицательных бактерий.