

МД ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЛИПИДНОГО БИСЛОЯ ДМФХ С ВОДНЫМ РАСТВОРОМ СУЛЬФОКСИДА ДЭСО

Душанов Э.Б., Горшкова Ю.Е.¹, Еремин Е.А.², Ташметов М.Ю.³

Лаборатория радиационной биологии, ОИЯИ, Россия, 141980, г. Дубна, ул. Жолио Кюри 6, +7(496) 216 21 19, dushanov@jinr.ru

¹Лаборатория нейтронной физики, ОИЯИ, Россия, 141980, г. Дубна, ул. Жолио Кюри 6, +7(496) 216 27 74, gorshk@nf.jinr.ru

²Самарский государственный университет, Межвузовский научно-исследовательский центр по теоретическому материаловедению, Россия, 443011, г. Самара, ул. Академика Павлова 1, +7 (846) 334-54-02, eremin_roman@inbox.ru

³Институт ядерной физики АН РУз, Узбекистан, 100214 Ташкент, пос. Улугбек

Исследование влияния сульфоксидов на липидные бислои вызвано широким спектром их использования как в качестве криопротекторов для сохранения биологических клеток, так и в качестве полярных апротонных растворителей в медицине для адресной доставки лекарств или фьюжн-агентов для направленного слияния клеток *in vitro* в биотехнологии. В отличие от диметилсульфоксида (ДМСО), диэтилсульфоксид (ДЭСО) менее токсичен. Кроме того, ДЭСО способен формировать сильные водородные связи с липидными молекулами, за счет чего должна увеличиваться его проникающая способность в липидный бислой.

В работе представлены результаты МД по влиянию концентрации ДЭСО на структуру бислоя 1,2-димиристоил-sn-глицеро-3-фосфатидилхолина (ДМФХ) в окружении водного раствора ДЭСО в двух различных пропорциях. Модельная структура ДМФХ с 128 липидными молекулами получена из CHARMM-GUI [4]. Растворы ДЭСО-вода в соотношениях 1:8 и 1:4 были добавлены с двух сторон от бислоя. Анализ полученных данных проведен инструментами пакета Gromacs [5], GridMAT [6] и SimToExp [7]. Данные, связанные с изменением толщины бислоя, взаимодействием и упорядочиванием сульфоксидов вокруг липидных молекул, а также влияние концентраций были проанализированы с учетом экспериментальных данных малоуглового нейтронного рассеяния [8].

Литература

1. Jo S., Kim T., Iyer V.G., Im W. CHARMM-GUI: a web-based graphical user interface for CHARMM // *J Comput Chem.* **29(11)**, 2008. 1859-65.
2. Van Der Spoel D., Lindahl E., Hess B., Groenhof G., Mark A.E., Berendsen H.J. GROMACS: fast, flexible, and free // *J Comput Chem.* **26 (16)**, 2005. 1701–18.
3. Allen W.J., Lemkul J.A., Bevan D.R. A grid-based membrane analysis tool for use with molecular dynamics GridMAT-MD // *J Comput Chem.* **30 (12)**, 2009. 1952-58.
4. Kučerka N., Katsaras, J. Nagle J. Comparing Membrane Simulations to Scattering Experiments: Introducing the SIMtoEXP Software // *Journal of Membrane Biology* **235 (1)**, 2010. 43-50.