

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СВОЙСТВ БИОЛОГИЧЕСКИХ МЕМБРАН И ИХ КОМПОНЕНТОВ<sup>1</sup>

Рабинович А.Л.

*ФГБУН Институт биологии КарНЦ РАН, г. Петрозаводск, ул. Пушкинская, 11;  
e-mail: rabinov@krc.karelia.ru*

Представлен обзор результатов теоретического изучения липидных бислоев и их компонентов. Методом молекулярной динамики (МД) моделировали совокупность гомогенных липидных бислоев в полноатомном приближении в жидкокристаллическом состоянии. Используются одинаковые условия (по температуре, давлению, методике проведения имитации, количеству молекул липидов в расчетной ячейке) и единый, апробированный в литературе набор параметров силового поля; липидные молекулы различались степенью ненасыщенности и/или длиной цепи углеводородных цепей. Методом Монте-Карло (МК) моделировали совокупность жирнокислотных цепей в невозмущенном состоянии. Химическое строение жирнокислотных цепей в МД и МК имитации было идентичным, лишь вместо концевой группы С=О цепи (связанной с глицериновым основанием) в молекуле фосфолипидов (МД моделирование), при имитации отдельной цепи (МК моделирование) была использована концевая группа СН<sub>3</sub>.

Выявлена совокупность экстремальных свойств у полиненасыщенных углеводородных цепей липидов; она должна приводить к существованию особых свойств соответствующих кластеров мембран. Функциональная роль компонентов мембран связана с молекулярным механизмом, который и обеспечивает реализацию свойств цепей того или иного строения. Выявлены соотношения “структура - свойства”; они позволяют предсказать некоторые общие тенденции, использовать для анализа и интерпретации ряда процессов, происходящих в биомембранах при изменениях внешних условий.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке средств федерального бюджета (гос. задание № 0221-2014-003), гранта НШ-1410.2014.4 Президента РФ и гранта 310465 (MembraneNanoPart) программы FP7.