

**Д. В. Журкин, А. Л. Рабинович** (Петрозаводск, ПетрГУ, ИБ КарНЦ РАН). **А. П. Любарцев** (Стокгольм, Стокгольмский ун-т). **Средние геометрические характеристики углеводородных цепей в невозмущенном состоянии и в составе липидных бислоев в жидкокристаллической фазе.**

Выявление свойств мембран различного строения, в том числе биомембран, - актуальная задача, решение которой позволит добиться прогресса как в науке, так и во многих технологических областях. Основу биомембран составляют молекулы фосфолипидов, они отличаются разнообразием строения полярных головных групп и углеводородных цепей. Исследование свойств большого количества реальных мембран трудоемко и требует больших временных затрат. Наряду с такими исследованиями целесообразно использовать теоретические подходы.

В настоящей работе использованы методы Монте-Карло и молекулярной динамики. Изучены свойства нескольких углеводородных цепей с *cis*-двойными связями: 16 : 0, 18 : 0, 18 : 1( $n - 9$ )*cis*, 18 : 2( $n - 6$ )*cis*, 18 : 3( $n - 3$ )*cis*, 18 : 4( $n - 3$ )*cis*, 18 : 5( $n - 3$ )*cis*, 20 : 4( $n - 6$ )*cis*, 20 : 5( $n - 3$ )*cis*, 22 : 6( $n - 3$ )*cis*.

Методом Монте-Карло осуществлено моделирование цепей в невозмущенном состоянии и вычислены средние расстояния  $\langle h \rangle$  между концевыми атомами углерода. Генерирование конформаций проводили с использованием существенной выборки по энергии ближних взаимодействий, с учетом взаимозависимости трех последовательных вдоль по цепи торсионных углов, изменяющихся непрерывно (0–360 град). Проведено сравнение величин  $\langle h \rangle$  с данными для  $\langle h \rangle$ , полученными методом молекулярной динамики для таких же цепей, входящих в состав молекул фосфатидилхолинов, образующих бислои. В обоих вариантах моделирования использовано одно и то же силовое поле и температура ( $T = 303$  К).

Показано, что хотя конформации цепей в невозмущенном состоянии не совпадают с их конформациями в жидкокристаллических бислоях (в области бислоя, в которой углеводородные цепи химически связаны с головными группами фосфолипидов, они «поджаты» цепями соседних молекул, в результате чего величины  $\langle h \rangle$  превышают таковые в свободном невозмущенном состоянии), относительная разница в  $\langle h \rangle$  оказалась сравнительно небольшой. Для цепей 16 : 0 и 18 : 0 эта разница составляет примерно 9–10 процентов, для ненасыщенных цепей с 18 атомами углерода — от 11 до 18 процентов, а для полиненасыщенной цепи с 22 атомами углерода составляет примерно 23 процента. Эти величины можно считать оценками степени влияния энергии дальних взаимодействий в цепи, взаимодействий с атомами соседних цепей и с атомами головных групп липидов в бислое по сравнению с влиянием на величину  $\langle h \rangle$  только энергии ближних взаимодействий, которая определяет состояние невозмущенной цепи.

Таким образом, конформационное поведение цепей фосфолипидов в бислоях по избранному в настоящей работе критерию ( $\langle h \rangle$ ) примерно на 77–91 процент определяется энергией ближних взаимодействий. Столь высокая степень влияния позволяет утверждать, что те соотношения между строением и свойствами молекул, которые

выявлены для них в невозмущенном состоянии (т. е. на основе моделирования методом Монте-Карло), можно в первом приближении (качественно) переносить на соответствующие соотношения для цепей, входящих в состав липидов в бислоях. Получение данных для невозмущенных молекул менее трудоемко и дает возможность провести расчеты для большого количества вариантов строения цепей и вычислить их свойства. При наличии экспериментальных данных об изменении жирнокислотного состава конкретных биомембран можно интерпретировать эти изменения на основе соотношений «структура–свойства» для невозмущенных молекул и пытаться описать картину процессов, происходящих в биомембранах.

Работа выполнена при поддержке программы Президента РФ — Ведущие научные школы (НШ-1410.2014.4).