

Молекулярно динамическое моделирование накопления бензола в липидной мембране

Д.С. Остроумов^{1,2}, А.В. Одинок¹

¹Центр Фотохимии РАН,

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Бензол и другие летучие органические соединения являются компонентами нефтепродуктов и полимерных материалов, повсеместно применяемых в быту и промышленности. Попадая внутрь организма, гидрофобные органические соединения способны накапливаться в клеточных мембранах [1], что приводит к изменению в структуре и свойствах липидного бислоя [2,3]. Эти изменения, по-видимому, ответственны за токсические и бактерицидные свойства многих органических растворителей. Компьютерное моделирование изменения свойств мембран в присутствии подобных соединений может помочь в понимании механизма их действия, что представляется важным с точки зрения медицины и микробиологии.

В данной работе мы осуществили молекулярно динамические исследования взаимодействия бензола с бислоем из димиристоилфосфатидилхолина (ДМФХ). Система, используемая для моделирования, представляла собой липидный бислой, состоящий из 72 молекул ДМФХ, находящийся в водной среде, состоящей из 1848 молекул воды, в которую добавлялся также бензол в различной концентрации (рис. 1).

В результате моделирования наблюдалось значительное увеличение площади поверхности мембраны и ее текучести, или, иными словами, набухание мембраны. Дополнительно были измерены другие параметры, ответственные за упорядочивание липидных цепей. К ним относятся: угол наклона липидных хвостов относительно нормали бислоя, дейтериевый параметр порядка и общая толщина мембраны. Изменения данных параметров оказались менее выражены.

Полученные зависимости всех посчитанных величин от концентрации бензола позволили выделить два режима, разделенные пределом растворимости бензола в воде. Когда количество бензола превышало это значение, то между слоями липида начинал формироваться слой из почти чистого бензола. Этот процесс соответствует образованию новой фазы и обеспечивает молекулярный механизм для механического разрыва бислоя под действием неполярных соединений.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского Научного Фонда 15-13-00163. Вычислительные мощности были представлены МСЦ РАН.

Литература

1. *Posokhov Y.O., Kyrychenko A.* Effect of acetone accumulation on structure and dynamics of lipid membrane studied by molecular dynamics simulation // *Computational Biology and Chemistry.* – 2013. – V. 43. – P. 23-31.
2. *Dreiem A.; Myrhe O.; Fonnum F.* Involvement of the extracellular signal regulated kinase pathway in hydrocarbon-induced reactive oxygen species formation in human neutrophil granulocytes // *Toxicology and Applied Pharmacology.* – 2003. – V. 190. – P. 102–110.
3. *Mishima K.; Watanabe H.; Kaneko S.; Ogihara T.* Membrane disordering induced by chloroform and carbon tetrachloride // *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces.* – 2003. – V. 28. – P. 307–312.

Рис. 1 – Конфигурации липидного бислоя с 0 (а), 36 (b) и 256 (с) молекулами бензола.