

СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ АДАПТАЦИЯ БЕЛКОВ К УСЛОВИЯМ МЕМБРАННОГО ОКРУЖЕНИЯ

Ефремов Р.Г.^{1,2}

¹*Институт биоорганической химии им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Москва, Россия;*

²*НИУ Высшая школа экономики, Москва, Россия*

Клеточные мембраны, помимо традиционно приписываемой им барьерной роли, выполняют и не менее важную задачу - обеспечивают эффективную аккомодацию многочисленных внешних агентов, включая мембранные белки (МБ). Молекулярные механизмы подобных процессов плохо изучены, однако недавно было показано, что важнейшим свойством липидных бислоев является их динамический гетерогенный характер, который критическим образом зависит от их локальных (до ~1 нм) особенностей структуры, гидрофобных и электрических свойств и т.д. Более того, при анализе мембран необходимо учитывать параметры их динамического поведения на временах от 10 пс. Совокупность указанных факторов представляет собой т.н. «мембранный ответ», т.е. активную реакцию водно-липидной среды на взаимодействующие с ней внешние молекулы. Таким образом, изучение белок-мембранных систем возможно лишь в случае учета взаимного влияния (адаптации) партнеров на молекулярном уровне. Одним из наиболее информативных методов решения таких задач является атомистическое компьютерное моделирование. Разработан вычислительный подход к анализу структурно-динамических параметров модельных мембран. Установлено что локальные перестройки мембранного окружения играют важную роль в связывании пептидов и МБ, вызывая специфическую кластеризацию липидов и инициируя образование дефектов в мембране. Показано, что липиды вносят значительный вклад в свободную энергию спонтанной димеризации МБ. Таким образом, МБ и их водно-липидное окружение в равной степени определяют характер биологического поведения клеточных мембран, взаимно сильно влияя друг на друга и согласованно реагируя на внешние воздействия.