

## Изучение самосборки липодисков методом молекулярной динамики

Научный руководитель – Орехов Филипп Сергеевич

*Селезнева Татьяна Сергеевна*

*Студент (бакалавр)*

Московский физико-технический институт, Москва, Россия

*E-mail: selezneva@phystech.edu*

Интегральные мембранные белки имеют высокую фармакологическую актуальность, но пока маленький процент структур изучен. Причиной этого является сложность его выделения с сохранением активности и стабильной структуры [2]. Использование стирол-малеинового сополимера (SMA) является перспективным подходом, позволяющим выделять мембранные белки в окружении, близком к нативному. В растворе SMA в комплексе с фосфолипидами формируются так называемые липодиски (фрагменты липидного бислоя, стабилизированные SMA).

Ранее было показано [1], что экстрагированные с использованием липодисков белки сохраняют свою структуру и активность. Тем не менее, детальный молекулярный механизм сборки липодисков и встраивания в них белков остается неизвестным. Его установление является важным шагом на пути к рациональному дизайну SMA с заданными свойствами.

Нами была создана полноатомная модель SMA и проведены расчеты молекулярной динамики стирол-малеинового сополимера с целью параметризации крупнозернистой модели в силовом поле Martini. Полученная модель в дальнейшем будет использована для моделирования взаимодействия сополимеров с липидным бислоем и самосборки липодисков.

### Источники и литература

- 1) Bagrov, D. V., Characterization of lipodisc nanoparticles containing sensory rhodopsin II and its cognate transducer from *Natronomonas pharaonis*// Biophysics 61.6 (2016): 942-949
- 2) Jonas M. Dörr, The styrene-maleic acid copolymer: a versatile tool in membrane research //Eur Biophys J (2016) 45:3-21

### Иллюстрации

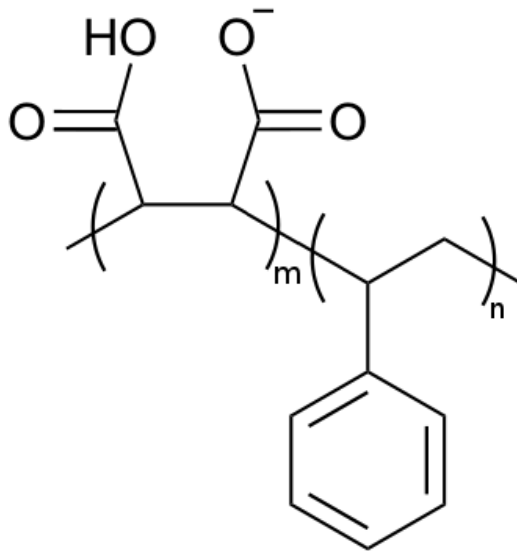


Рис. 1. Стирол-малеиновый сополимер.  $n = 3$   $m = 1$