

# Моделирование бислоя, имитирующего внутреннюю мембрану митохондрий с использованием cross-grain молекулярной динамики

• *П.Д. Короткова<sup>1</sup>, А.А. Юрченко<sup>2</sup>, В.И. Тимофеев<sup>3,4</sup>, А.Р. Гусельникова<sup>2</sup>, А.Б. Шумм<sup>1,4</sup>, Г.К. Владимиров<sup>5</sup>*

• <sup>1</sup> Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова», Москва.

• <sup>2</sup> Федеральное государственное бюджетное учреждение «Национальный медико-хирургический Центр имени Н.И. Пирогова» Министерства здравоохранения Российской Федерации, Москва

• <sup>3</sup> Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, Москва

• <sup>4</sup> Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук

• <sup>5</sup> Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования Первый Московский Государственный Медицинский Университет имени И. М. Сеченова Министерства здравоохранения Российской Федерации (Сеченовский университет), Москва.

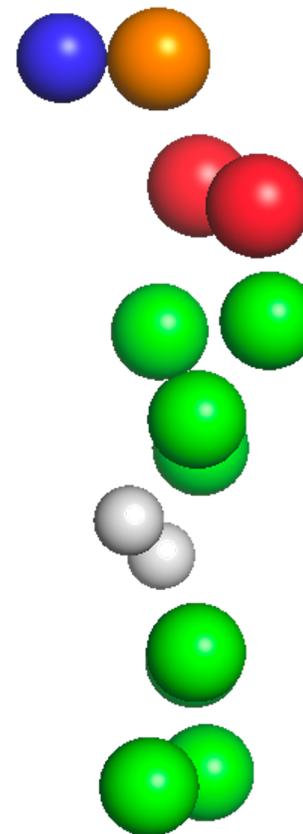
• *Докладчик:*

• *Короткова П.Д., студентка 3-его курса Факультета фундаментальной медицины МГУ им. М.В. Ломоносова*

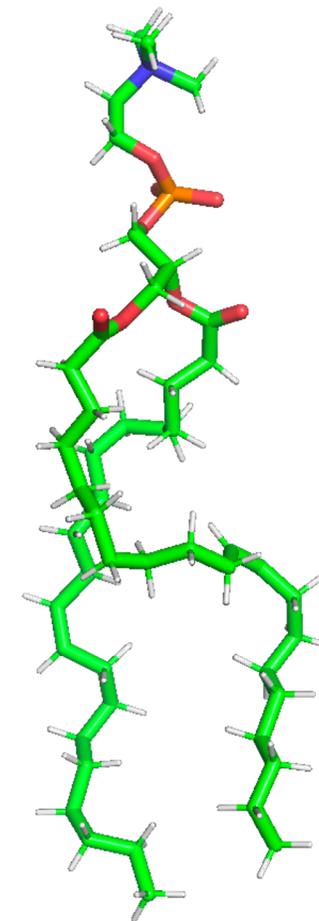
# Характеристика силового поля Martini:

- Используется для coarse-grained молекулярно-динамического моделирования биомолекулярных систем.
- Один центр взаимодействия – 4 тяжелых атома + связанные с ними водороды

Martini в  
CHARMM-GUI



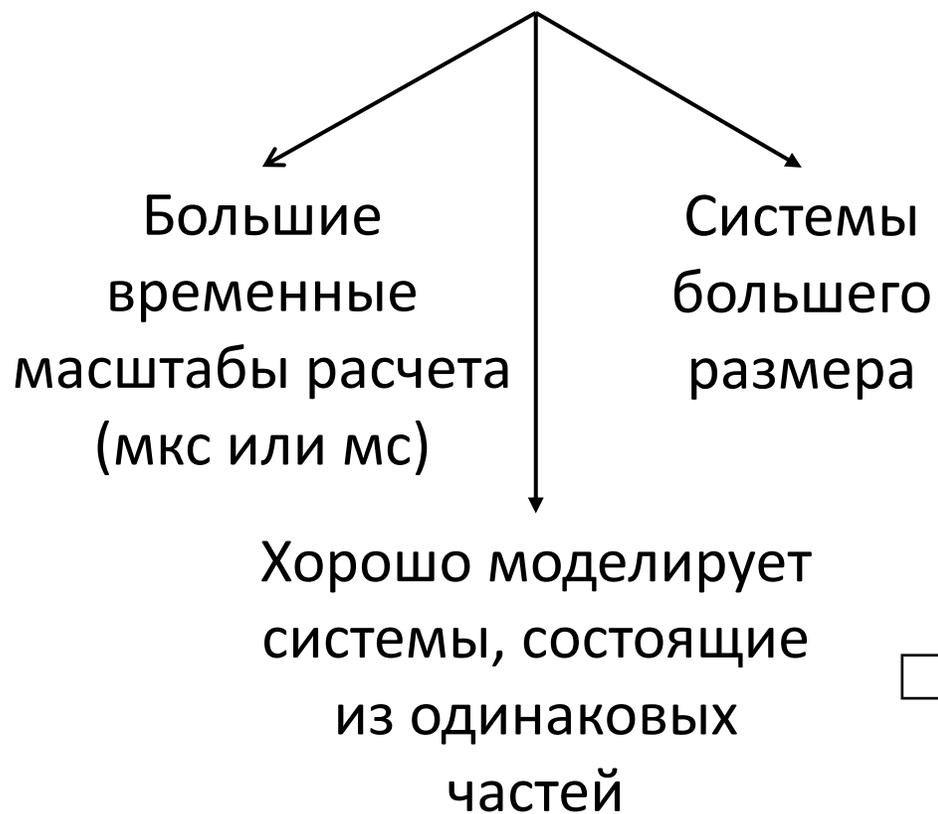
Membrane builder  
в CHARMM-GUI



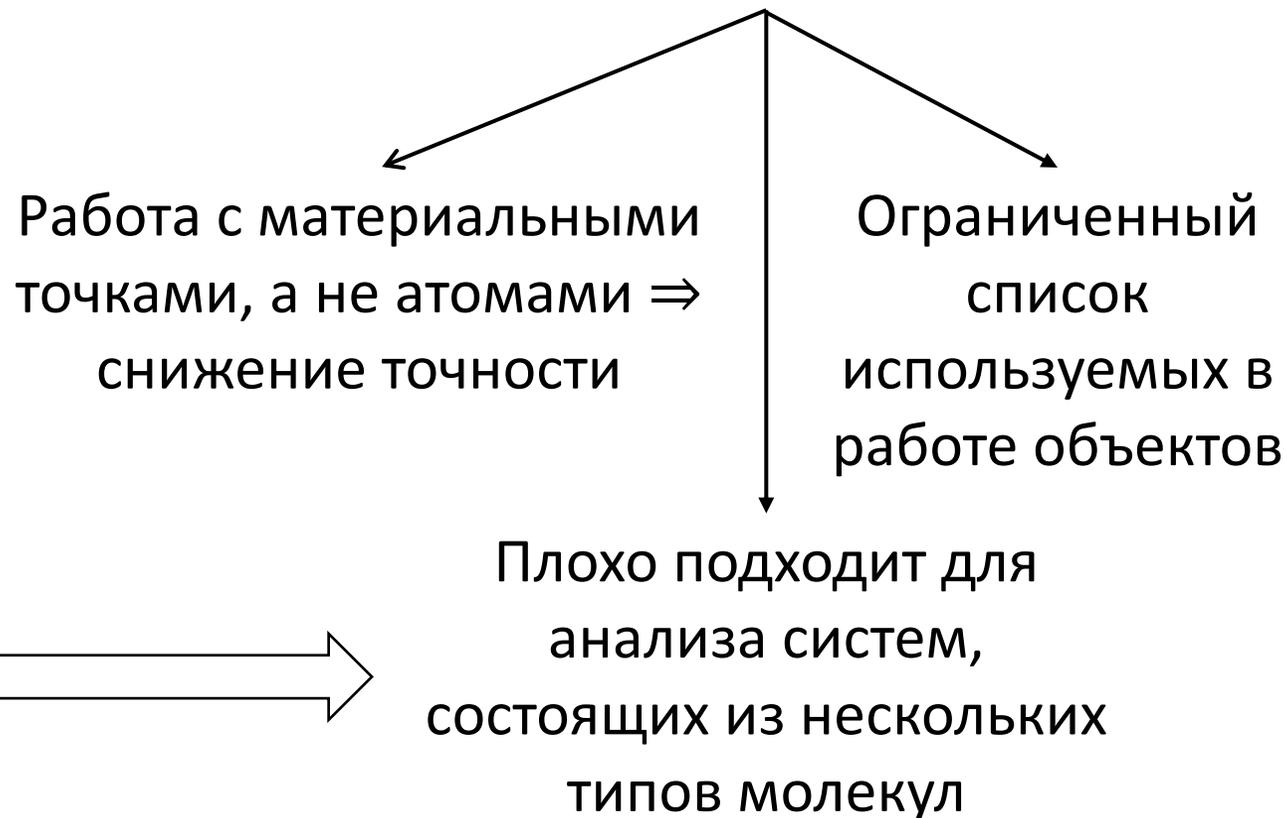
На рисунке изображена молекула DGPC

# Сравнение Coarse-grained и полноатомного подхода

## Достоинства



## Недостатки



# Объект исследования:

## Дилинолеилфосфатидилхолин (DLiPC)

Формула DLiPC:

- Фосфатидилхолин – один из основных компонентов внутренней мембраны митохондрий
- Цвиттер-ион
- Имеет двойные связи
- Двойные связи расположены так, что формируют бис-аллильный участок.

Повышенная  
текучесть

Пониженная  
температура  
плавления

Повышенная окисляемость



# Наши результаты:

- Промоделирован бислои, состоящий из DLiPC
- Содержание DLiPC в каждом слое: 64 молекулы

