

**Моделирование ассоциатов глицирризиновой
кислоты внутри липидной мембраны**

Шелепова Е. А.

Институт химической кинетики и горения СО РАН
Новосибирский государственный университет

Известно, что глицирризиновая кислота (ГК) усиливает действие некоторых лекарственных препаратов. Механизм этого усиления может быть связан с влиянием ГК на проницаемость мембран. Данная работа посвящена изучению влияния ГК на модельные липидные бислои методом молекулярно-динамического моделирования.

Ранее мы исследовали поведение одной молекулы ГК вблизи липидного бислоя. Было показано, что молекула ГК, находящаяся в воде, способна переходить в липидный бислой. Однако существенного влияния одной молекулы ГК на мембрану обнаружено не было. В данной работе мы исследовали модели, в которых четыре молекулы ГК помещались внутрь липидного бислоя. Было показано, что молекулы ГК свободно диффундируют среди липидов бислоя и могут образовывать ассоциаты друг с другом. В случае менее упорядоченного и более подвижного бислоя, состоящего из молекул диолеилфосфатидилхолина (DOPC), ассоциаты ГК возникают за счет формирования водородных связей между молекулами ГК. Однако такие ассоциаты неустойчивы и существуют обычно несколько наносекунд. Напротив, в более упорядоченном бислое из молекул дипальмитоилфосфатидилхолина (DPPC) могут возникать устойчивые долгоживущие ассоциаты. Стабилизации этих ассоциатов способствуют как водородные связи, так и имеющаяся упорядоченность липидов. Кроме того, в бислое DPPC наблюдается локальное уменьшение толщины мембраны вблизи ассоциата или группы молекул ГК, вызванное образованием водородных связей между молекулами ГК и головками липидов из обоих липидных слоев. Таким образом, молекулы ГК способны образовывать ассоциаты внутри мембраны, и связывать гидрофильные части противоположных слоев мембраны.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук Медведев Н. Н., канд физ.-мат. наук Ким А. В.