

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ БЕЛОК-ИНДУЦИРОВАННОГО МЕМБРАННОГО СЛИЯНИЯ¹

Р.Ю. Молотковский, С.А. Акимов

*Лаборатория биоэлектрохимии ИФХЭ РАН,
119071, Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4;
e-mail: swinka87@gmail.com*

Исследовалась начальная стадия белок–индуцированного слияния, во время которой происходит локальная деформация и сближение мембран. В работе мембрана считалась жидкокристаллической средой, подверженной упругим деформациям, при этом учитывались две деформационные моды мембраны — поперечный изгиб и наклон липидных молекул. Энергия системы вычислялась в квадратичном приближении по этим деформациям. Рассматривались отдельные белки слияния, хаотически ориентированные в цилиндрически симметричном кластере. Белки считались абсолютно твердыми мембранными включениями цилиндрической или конической формы, наклоненными по отношению к плоскости мембраны на некоторый угол. Показано, что минимуму энергии соответствует центрально-симметричная ориентация белков. Рассчитана зависимость формы мембраны от ориентации белков, и вычислен энергетический барьер, необходимый для перехода слияния в следующую стадию. Величина барьера по порядку величины составляет $100\ kT$. Кроме того, исследован цилиндрически симметричный белковый кластер. Белки моделировались как область мембраны с ненулевой спонтанной кривизной. Рассчитана энергия системы и построена форма мембраны в зависимости от различных параметров, в том числе, индуцированной спонтанной кривизны. Оказалось, что форма и энергия мембраны сильно зависят от типа граничных условий. В частности, показано, что без приложения внешних моментов невозможно формирование достаточно большой мембранной выпуклости ($> 1\ \text{нм}$) при положительной спонтанной кривизне белка, которая в природе обеспечивается частичным встраиванием белка в липидный монослой.

¹ Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (госконтракт № 14.740.11.1409, соглашение № 8166), гранта РФФИ № 11-04-01001, Программы Президиума РАН «Молекулярная и клеточная биология»