

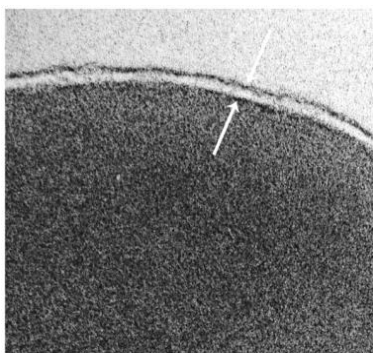


# Сучасні комп'ютерні методи дослідження нанорозмірних та біологічних систем

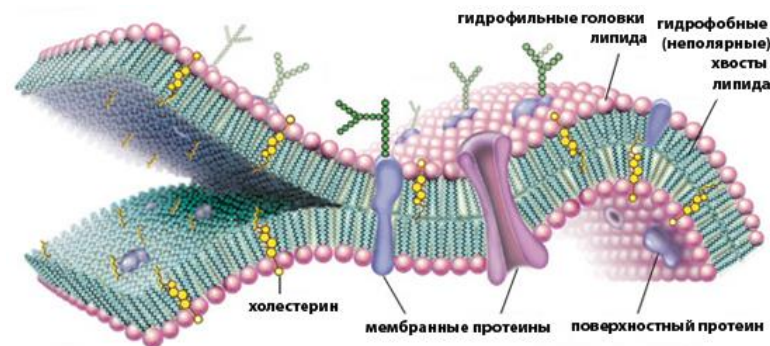
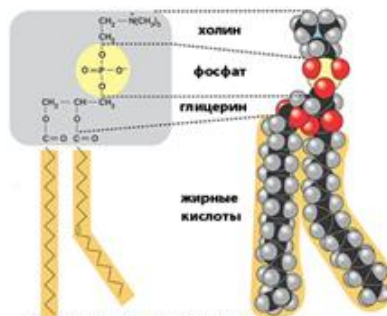


## Лекція № 5

Розвиток уявлень про молекулярну будову біомембран.  
Фосфоліпідні бішари та мембрани.  
Сучасна модель будови ліпідної мембрани.



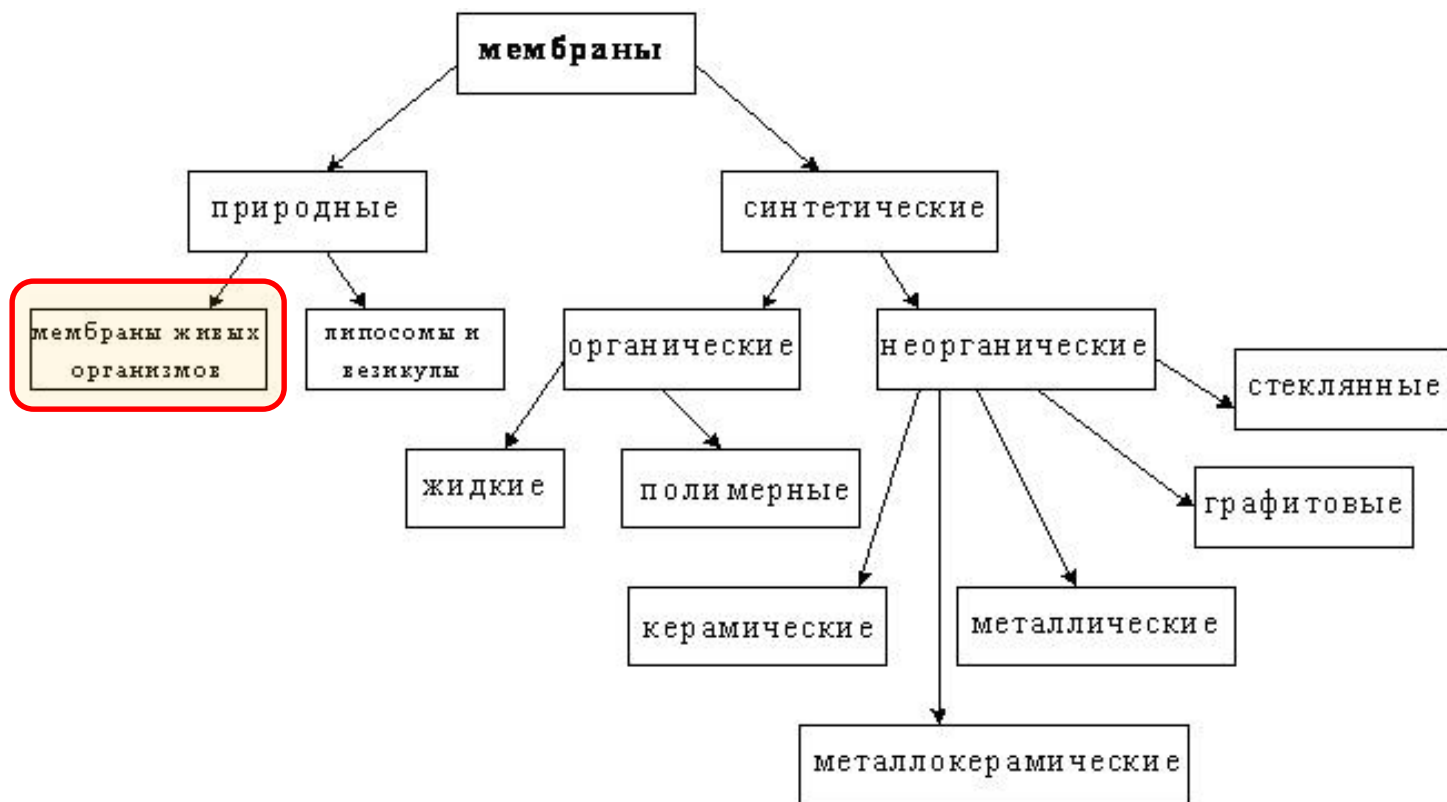
50 nm



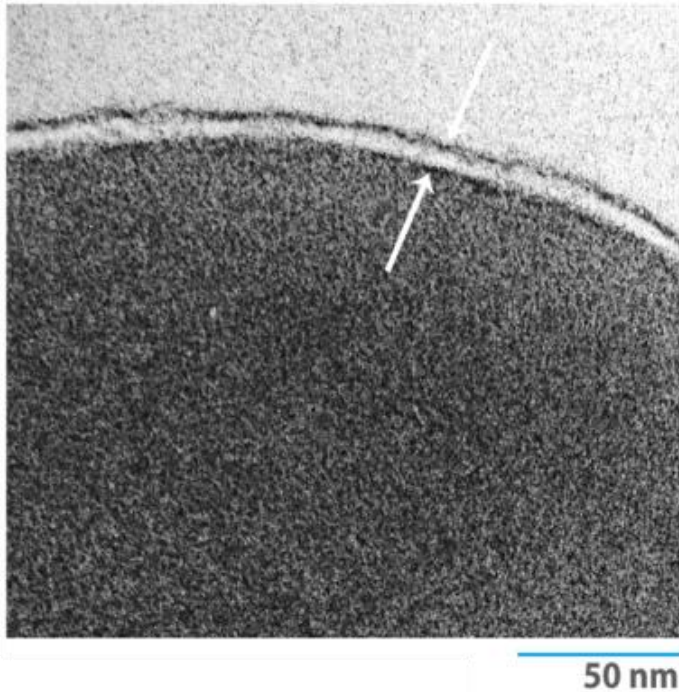
## **План Лекції № 5**

- Розвиток уявлень про молекулярну будову біомембран**
- Основні класи та будова органічних ліпідів**
- Впорядковані супрамолекулярні ліпідні системи**
- Основні функції біологічних мембран у живій клітині**
- Сучасна модель будови ліпідної мембрани**
- Пасивний та активний транспорт через мембрану**

## Мембрана – это полупроницаемый разделитель сред



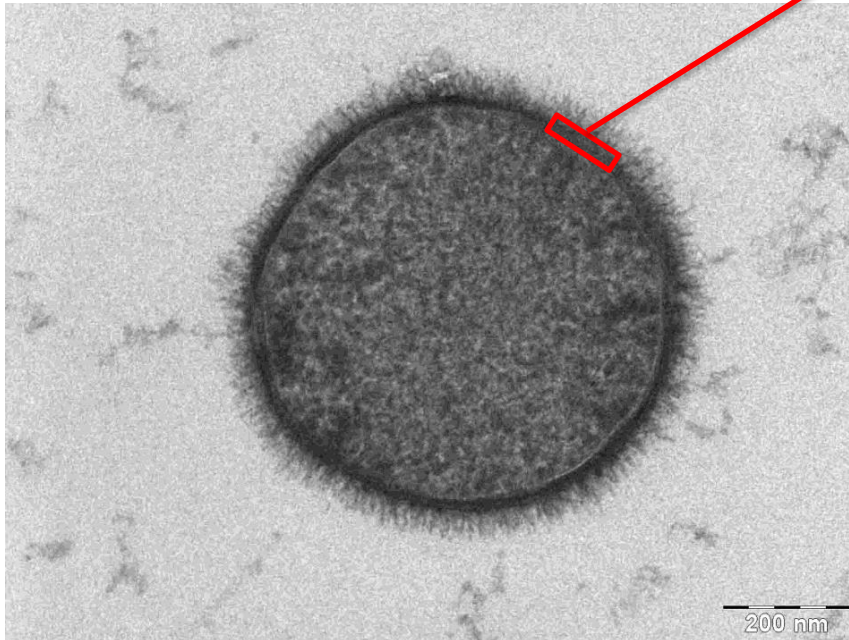
## Развитие представлений о строении клеточной мембраны



**Клеточная мембрана** отделяет содержимое клетки от внешней среды, обеспечивая её целостность; регулируют обмен между клеткой и средой. Клеточная мембрана представляет собой двойной слой (бислой) состоящий из молекул природных липидов.

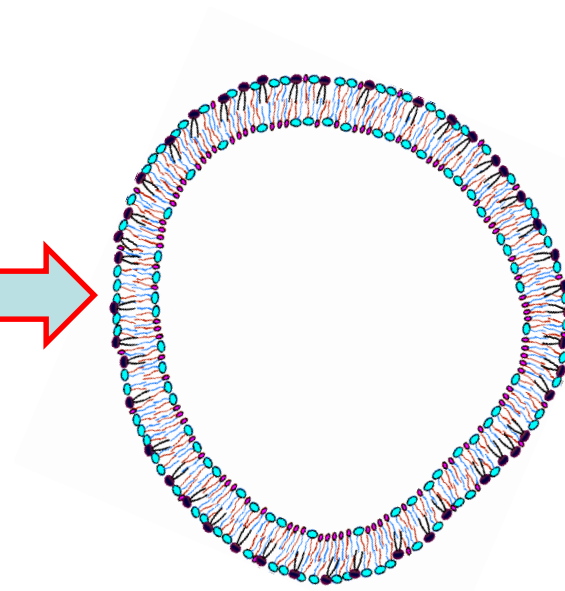
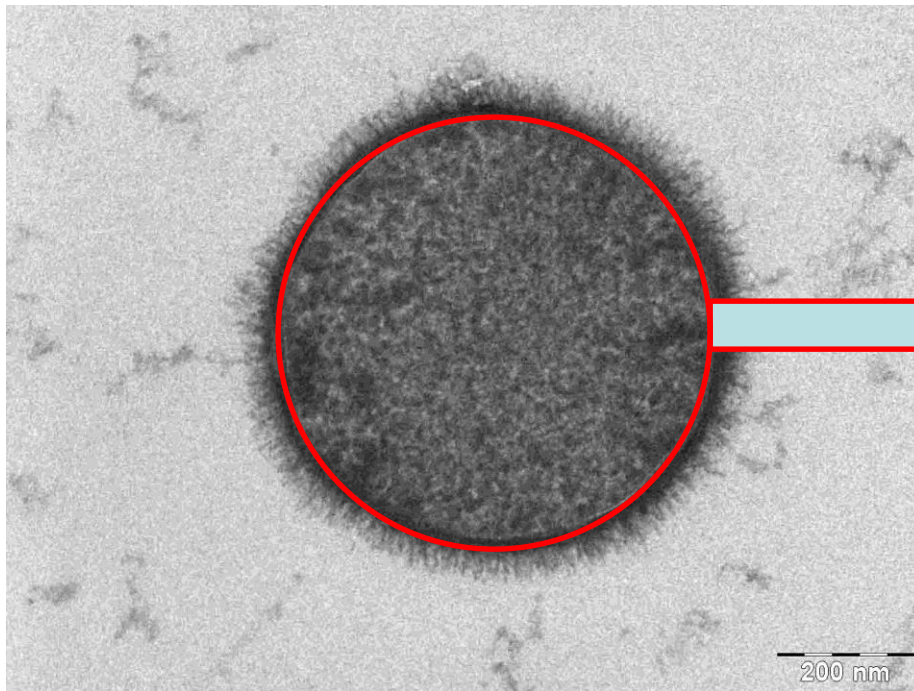
## Развитие представлений о строении клеточной мембраны

**мембрана**

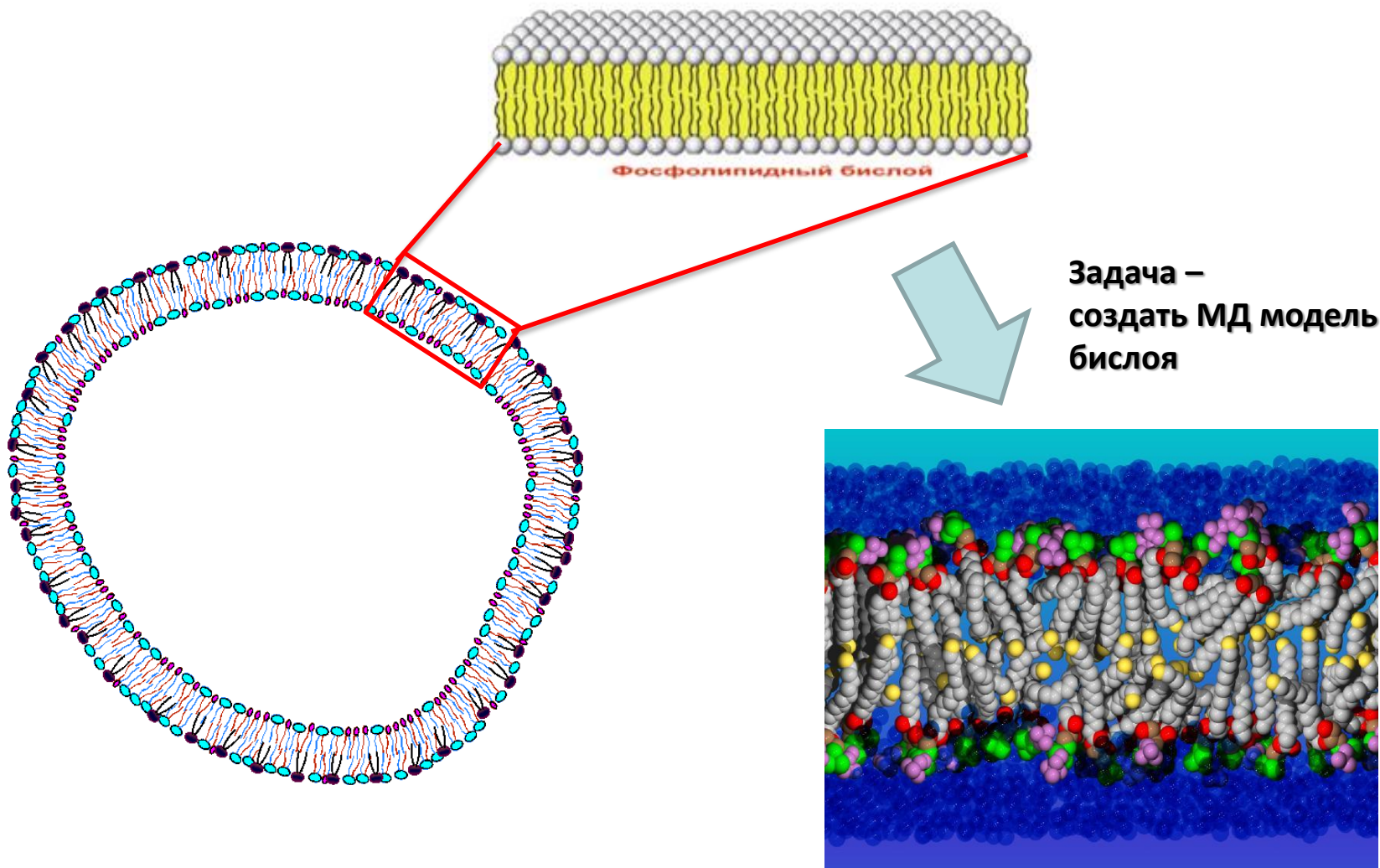


Снимок бактерии выполненный  
электронным трансмиссионным  
микроскопом.  
(оптическое разрешение 200 нм)

**Клеточная мембрана** представляет собой двойной слой (бислой) состоящий из молекул природных липидов



**Клеточная мембрана** представляет собой двойной слой (бислои) состоящий из молекул природных липидов



# Классификация липидов

## ЛИПИДЫ

Органические вещества биологической природы, нерастворимые в воде, но растворимые в неполярных растворителях (бензол, эфир, хлороформ)

### ОМЫЛЯЕМЫЕ ЛИПИДЫ

При гидролизе в щелочной среде образуют спирт и соли жирных кислот

#### ПРОСТЫЕ ЛИПИДЫ

При гидролизе образуют спирты и жирные кислоты

ВОСКА

ТРИАЦИЛГЛИЦЕРИНЫ  
(нейтральные жиры)

#### СЛОЖНЫЕ ЛИПИДЫ

При гидролизе образуют спирты, жирные кислоты и другие вещества (углеводы, азотсодержащие вещества, фосфорную кислоту)

#### ФОСФОЛИПИДЫ

##### гликолипиды

Цереброзиды

Сульфолипиды

Ганглиозиды

##### ГЛИЦЕРОФОСФОЛИПИДЫ

Фосфатидилхолины  
(лецитины)

Фосфатидилэтаноламины  
(кефалины)

Фосфатидилсерины

Фосфатидилинозитолы

Плазмалогены

Кардиолипины

##### СФИНГОФОСФОЛИПИДЫ

Сфингомиелины

### НЕОМЫЛЯЕМЫЕ ЛИПИДЫ

Не гидролизуются в щелочной или кислой среде

Производные насыщенного углеводорода – циклопентанпер-  
гидрофенантрена.  
Стероиды делят на группы в зависимости от количества  
углеродных атомов боковой цепи у C<sub>17</sub>

#### СТЕРИНЫ, СТЕРИДЫ

Эфиры стерinov и жирных кислот (восемь углеродных атомов у C<sub>17</sub>) – холестерин, эфиры холестерина

#### ЖЕЛЧНЫЕ КИСЛОТЫ

Холевая, дезоксихолевая и хенодезоксихолевая кислоты (пять углеродных атомов у C<sub>17</sub>)

#### СТЕРОИДНЫЕ ГОРМОНЫ

Кортикостероиды и прогестероны (два углеродных атома у C<sub>17</sub>),

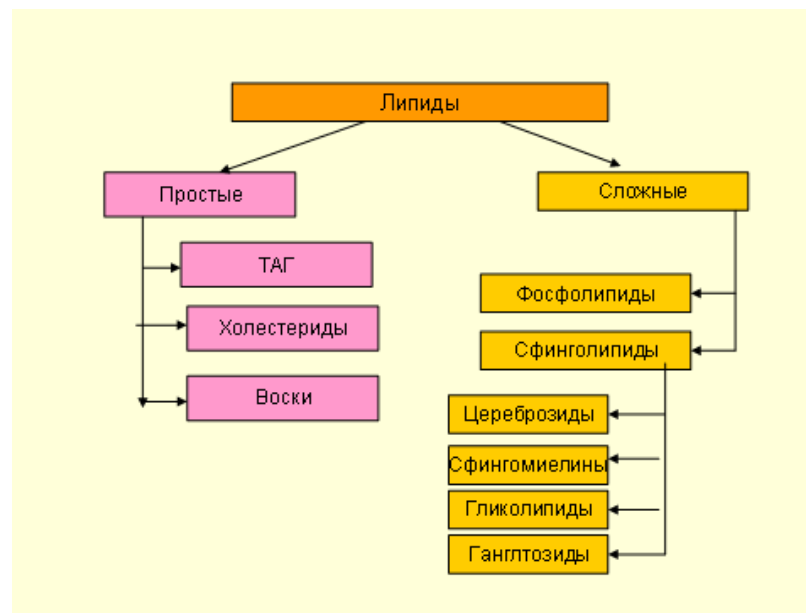
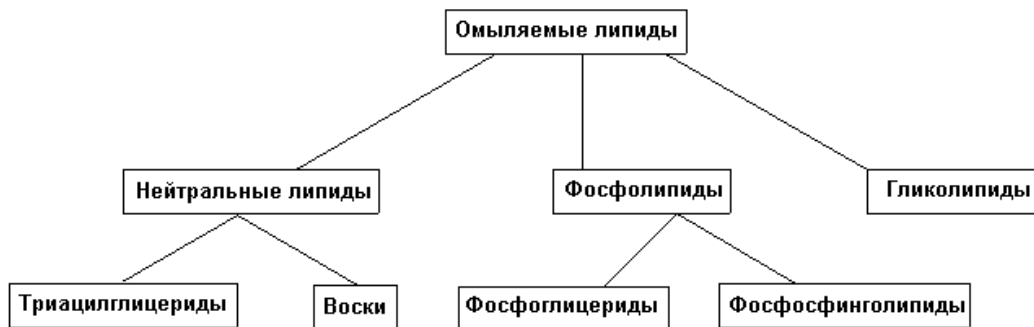
#### СТЕРОИДНЫЕ ВИТАМИНЫ

Витамины D<sub>2</sub> и D<sub>3</sub>, провитамины D (эргостерин, 7-дегидрохолестерин), восемь углеродных атомов у

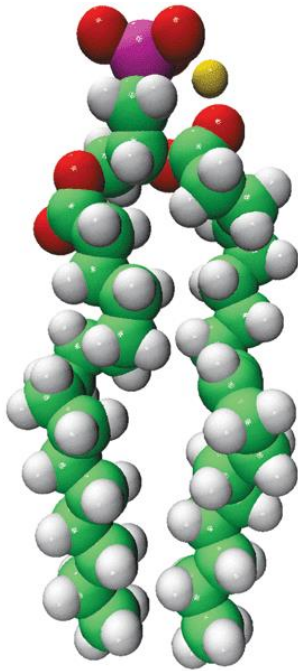


# Классификация липидов

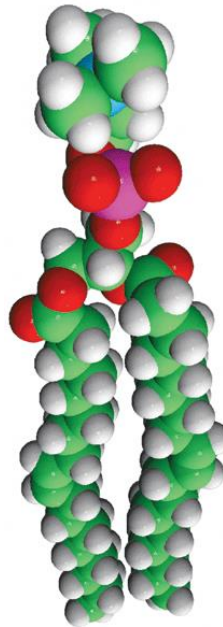
Классификация омыляемых липидов



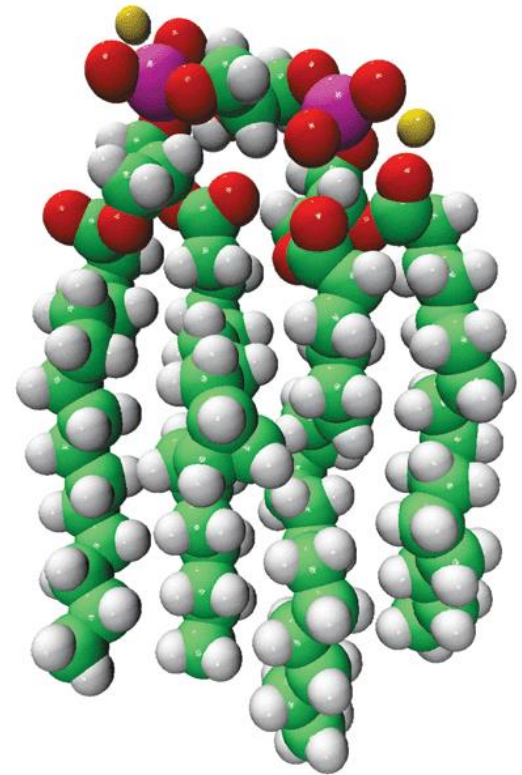
**Липиды** – органические соединения, которые содержат глицерин, жирные кислоты, фосфорную кислоту, и азотистое соединение



**Фосфатидиловая  
кислота**



**ДОПС**



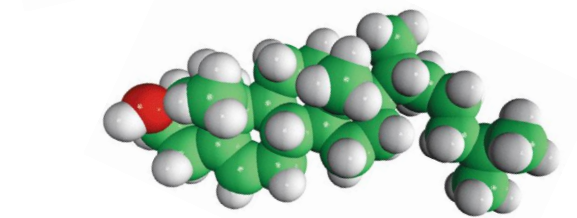
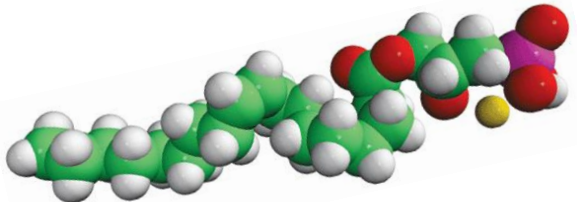
**Кардиолипин**

# Коммерчески доступные липиды

Avanti<sup>®</sup>  
POLAR LIPIDS, INC.

search...

Products | Lipidomics | Liposomes & Equipment | Bulk Lipid Manufacturing | Analytical Services | Technical Support | General Info



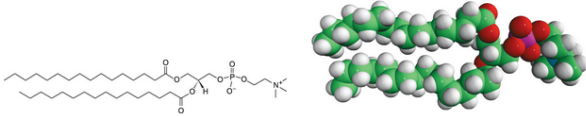
- Products
- New Products
  - Natural Lipids
  - Sphingolipids
  - Phospholipids
  - PC & LPC
  - Natural
    - Saturated Fatty Acid
    - Unsaturated Fatty Acid
    - Mixed Acyl
  - Lyso
  - PA, LPA & Cyclic LPA
  - PE & LPE
  - PG & LPG
  - PS & LPS
  - PI, PIP & LPI
  - Cardiolipin
  - Ether Lipids
  - Plasmalogens
  - Oxidized Lipids
  - Bis(Monoacylglycerol)Phosphate (BMP)
  - Lipids for Supported Monolayers & Bilayers
  - Sterol-Modified Phospholipids
  - Inverted Headgroups
  - Sterols
  - Bioactive Lipids
  - Coenzyme A & Derivatives
  - Fatty Acid Modified Lipids
  - Headgroup Modified Lipids
  - Stable Isotopes & ESR Probes
  - Fluorescent Lipids
  - Polymers & Polymerizable Lipids
  - Cationic Lipids (Transfection)
  - Neutral Lipids
  - Detergents
  - Aurora™ Gold Probes
  - Click Reagents
  - Lipidomics
  - Liposomes & Equipment
  - Bulk Lipid Manufacturing
  - Analytical Services
  - Technical Support
  - General Info

Home » Products » Phospholipids » PC & LPC » Saturated Fatty Acid

**16:0 PC (DPPC)**  
**1,2-dipalmitoyl-*sn*-glycero-3-phosphocholine**  
850355

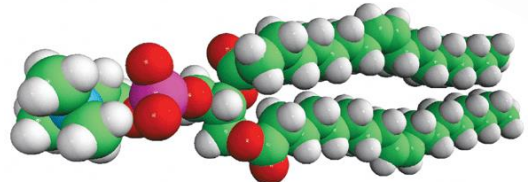
850355C			850355P		
Chloroform			Powder		
25 mg	\$33.00	Add to Cart	25 mg	\$23.00	Add to Cart
200 mg	\$53.00	Add to Cart	200 mg	\$43.00	Add to Cart
500 mg	\$94.00	Add to Cart	500 mg	\$84.00	Add to Cart
1 g	\$135.00	Add to Cart	1 g	\$125.00	Add to Cart

All Prices in US Dollars.



Data | Description | Solubility | References | Downloads

Synonyms	1,2-dihexadecanoyl- <i>sn</i> -glycero-3-phosphocholine DPPC PC(16:0/16:0)
Cas Number	63-89-8
	CAS Registry Number is a Registered Trademark of the American Chemical Society
Molecular Formula	C <sub>40</sub> H <sub>80</sub> NO <sub>8</sub> P
Molecular Weight	734.039
Exact Mass	733.562
Percent Composition	C 65.45%, H 10.98%, N 1.91%, O 17.44%, P 4.22%
Purity	>99%
Stability	2 years
Storage	-20°C
Transition Temp	41°C
CMC	0.46nM

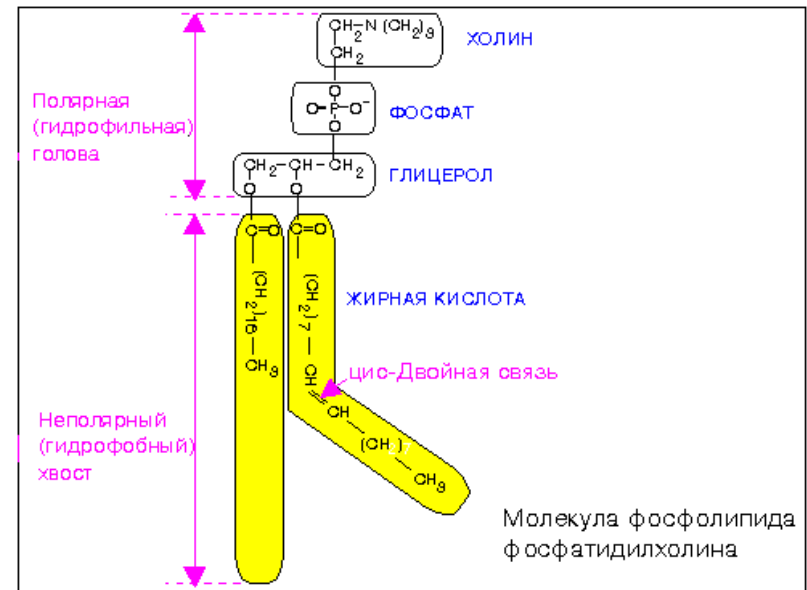
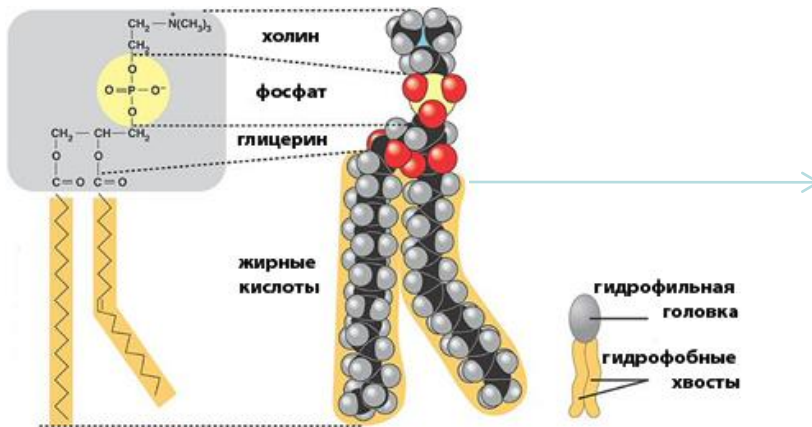


Not What You Are Looking For? - [Request A Custom Synthesis](#)

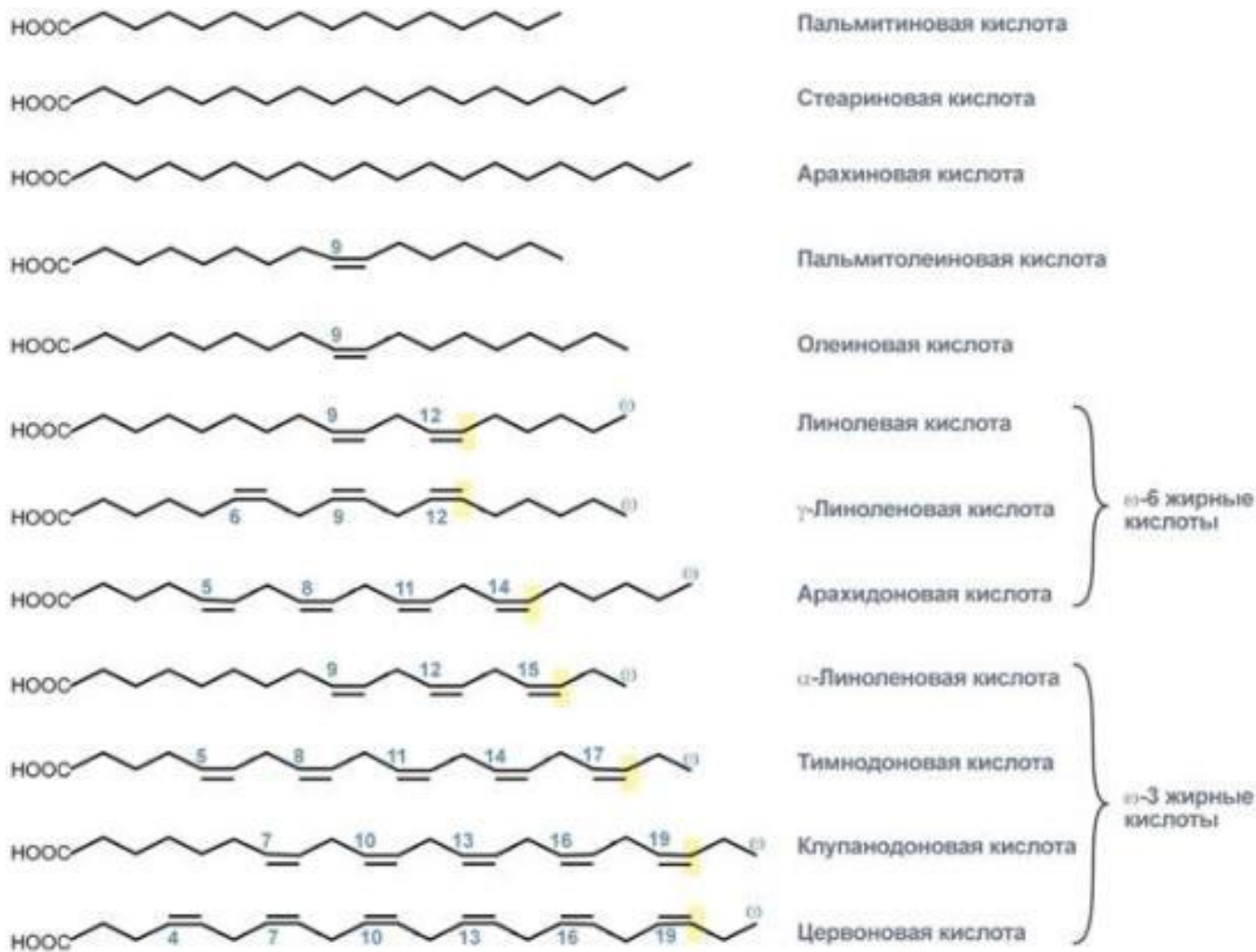
**Dox-NP<sup>™</sup>**  
for cancer research

**LIPOSOMAL DOXORUBICIN**

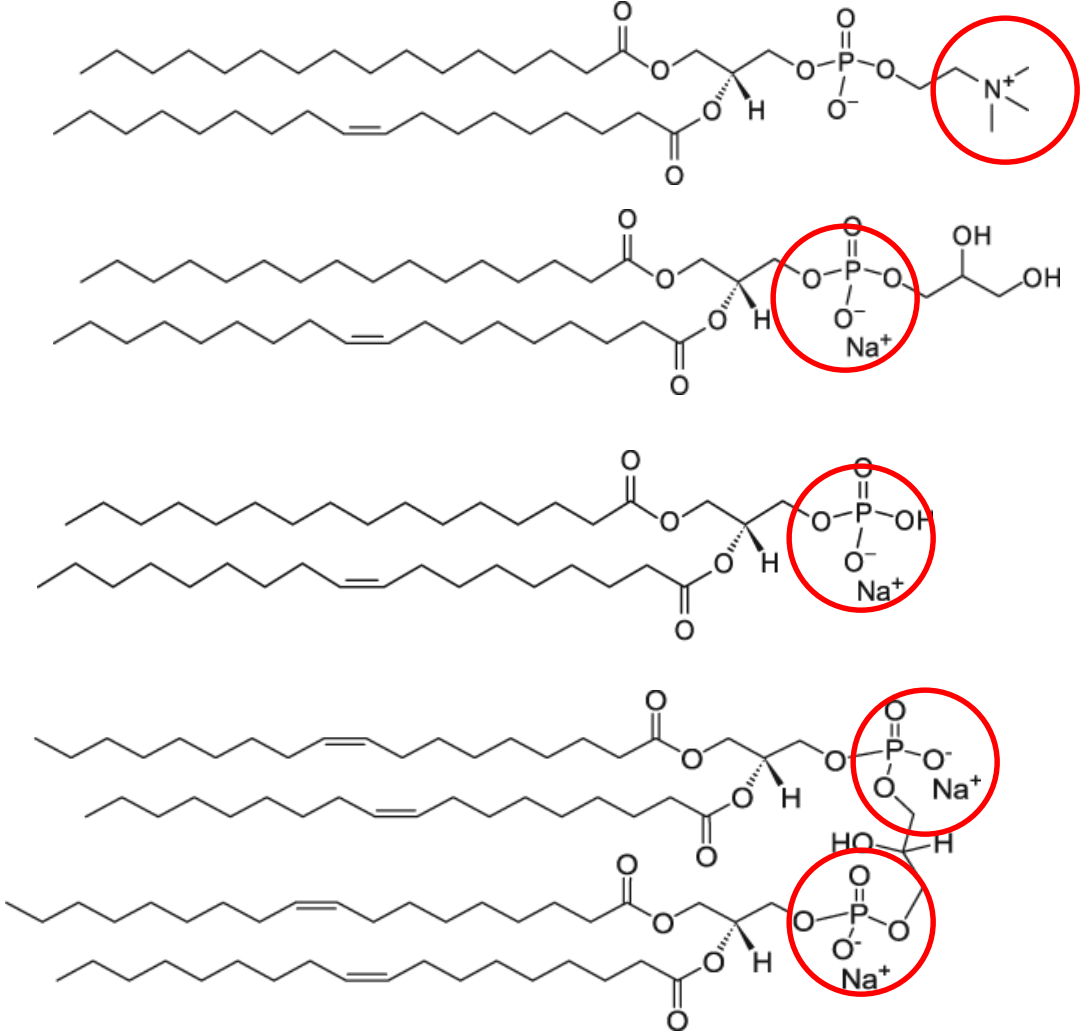
**Фосфолипиды** – сложные липиды, содержащие глицерин, жирные кислоты, фосфорную кислоту, и азотистое соединение



## Свойства и функции липидов зависят от строения остатков жирных кислот

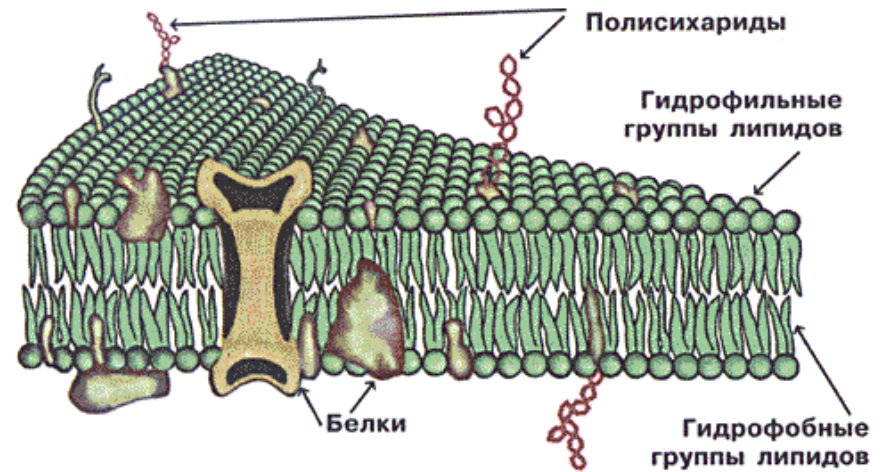
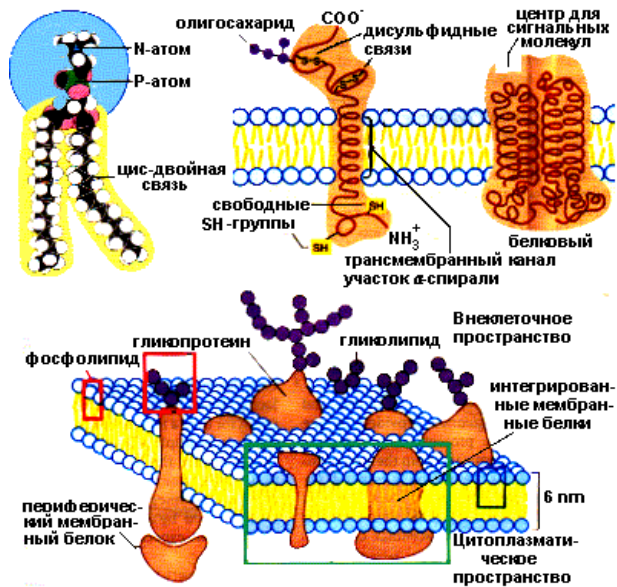


# Свойства и функции липидов зависят от их заряда



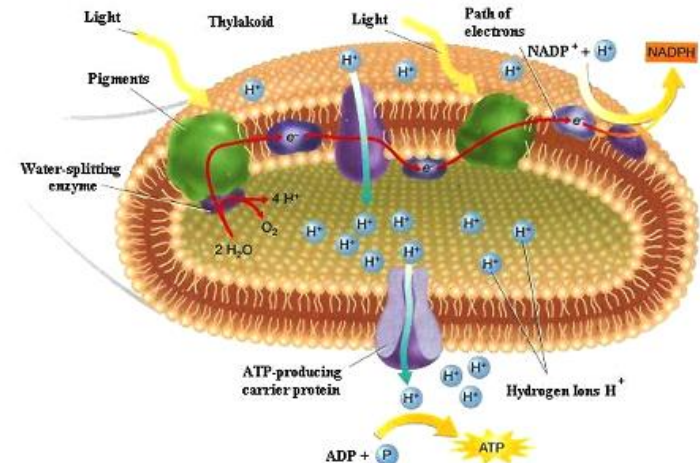
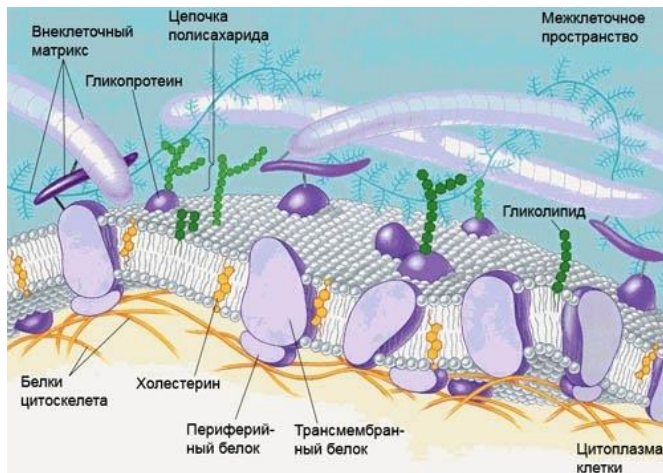
# Современные представления о строении биологических мембран

## Мозаичная модель мембраны

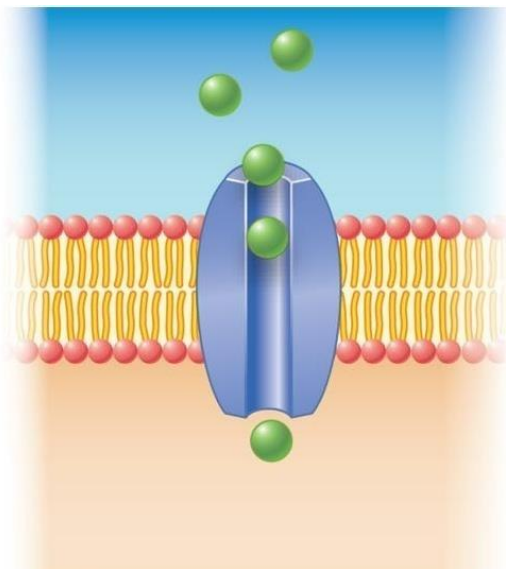


**Биологическая мембрана** включает трансмембранные и периферийные протеины и белки. Некоторые из интегральных белков выполняют функцию обмена выступая в качестве транспортеров и ионных каналов

## Мозаичная модель мембраны

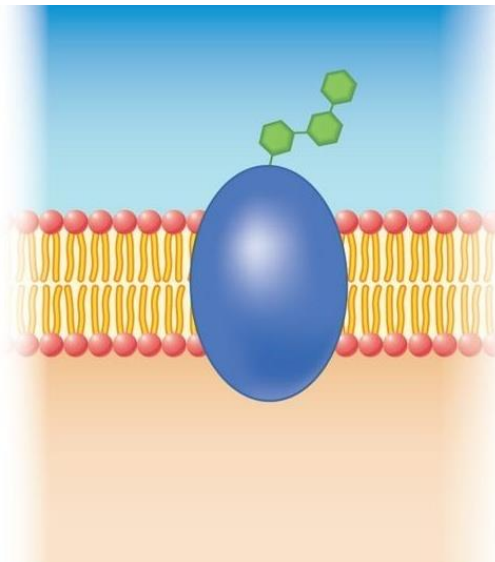






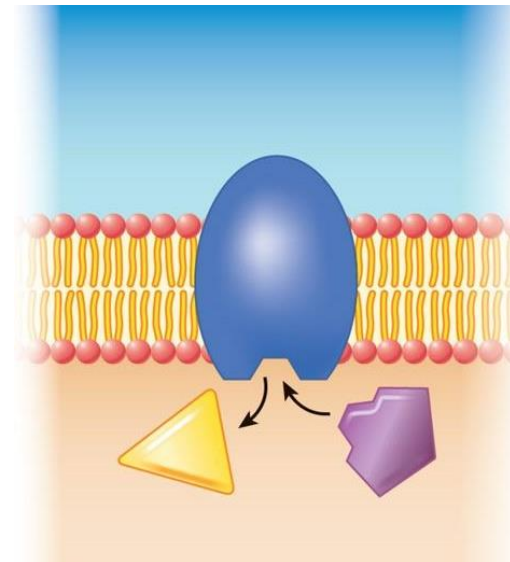
## Транспортные протеины

Ионные каналы обеспечивают селективный транспорт веществ и ионов через мембрану



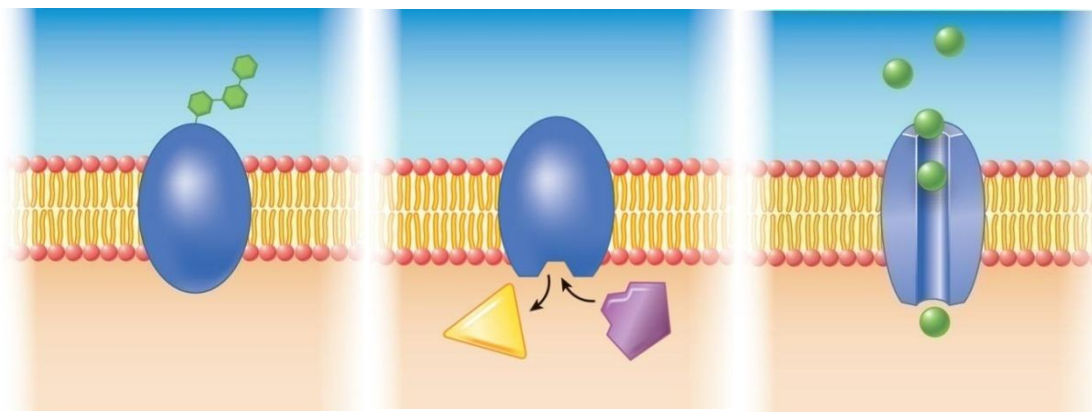
## Распознавательные протеины

Рецепторные гликопротеины являются сигнальными протеинами определяющими идентичность клетки

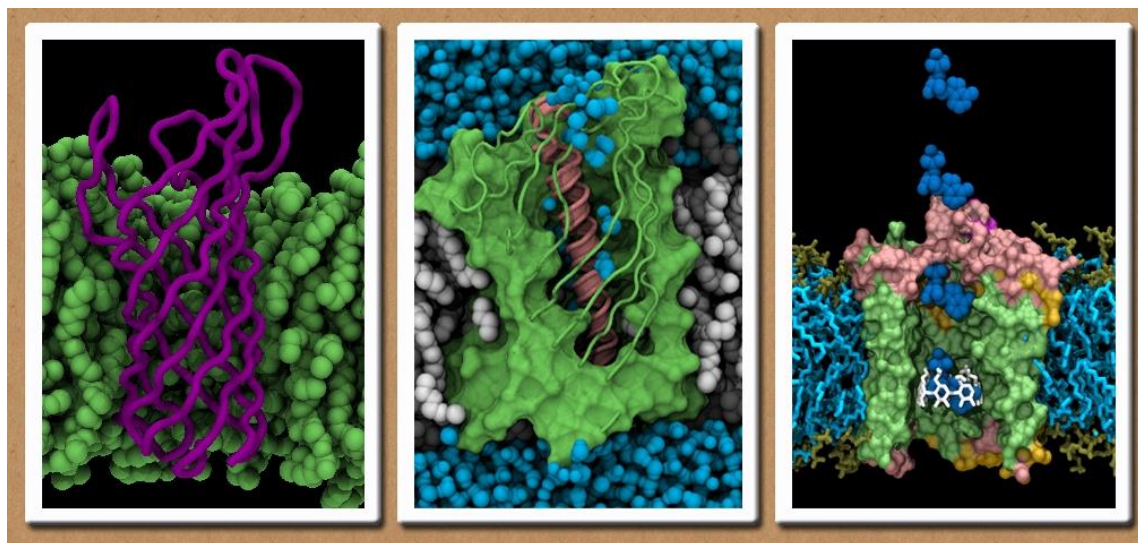


## Энзиматические протеины

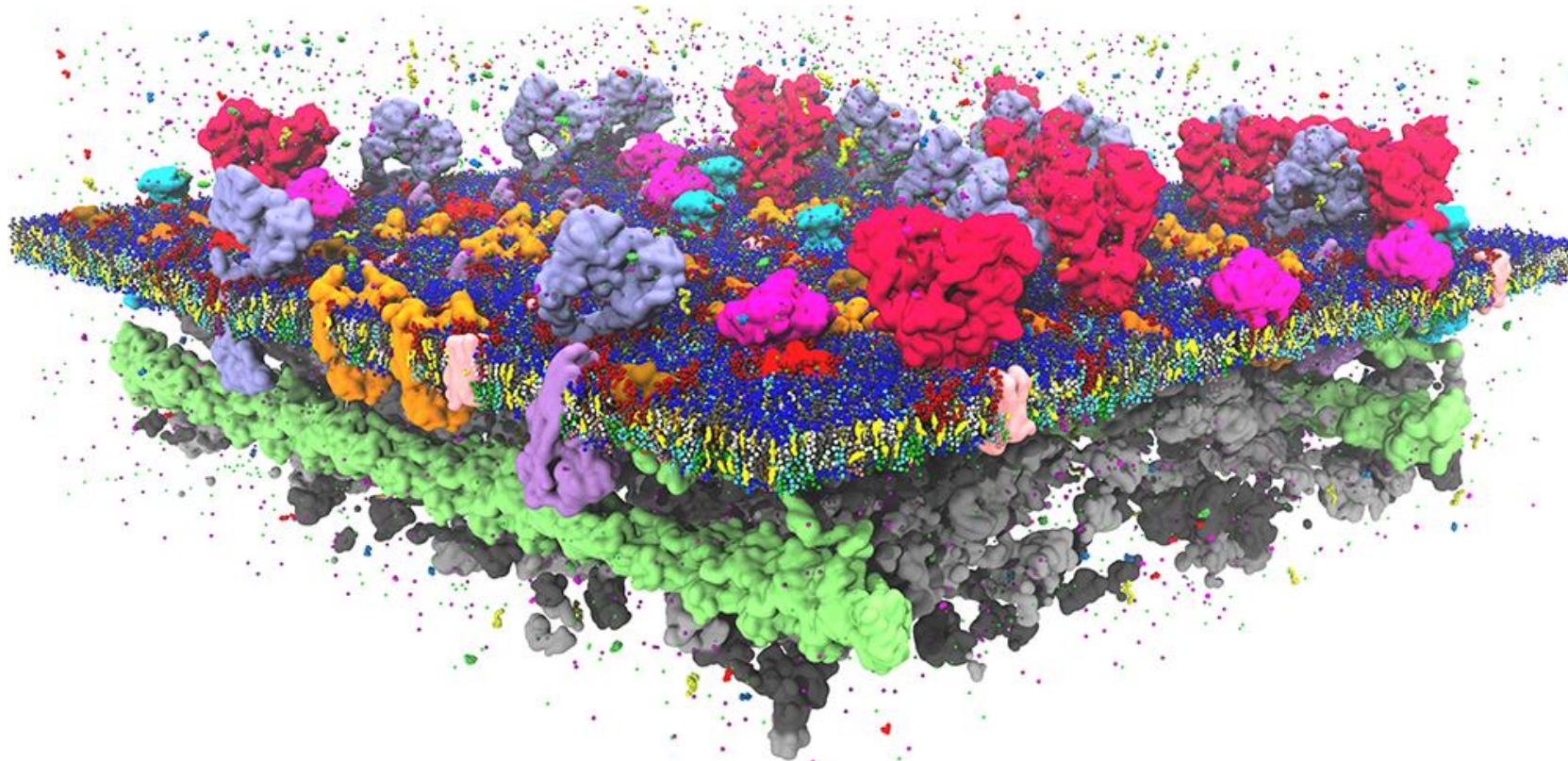
Мембранные протеины способны выполнять запрограммированные биохимические реакции



**МД модель**



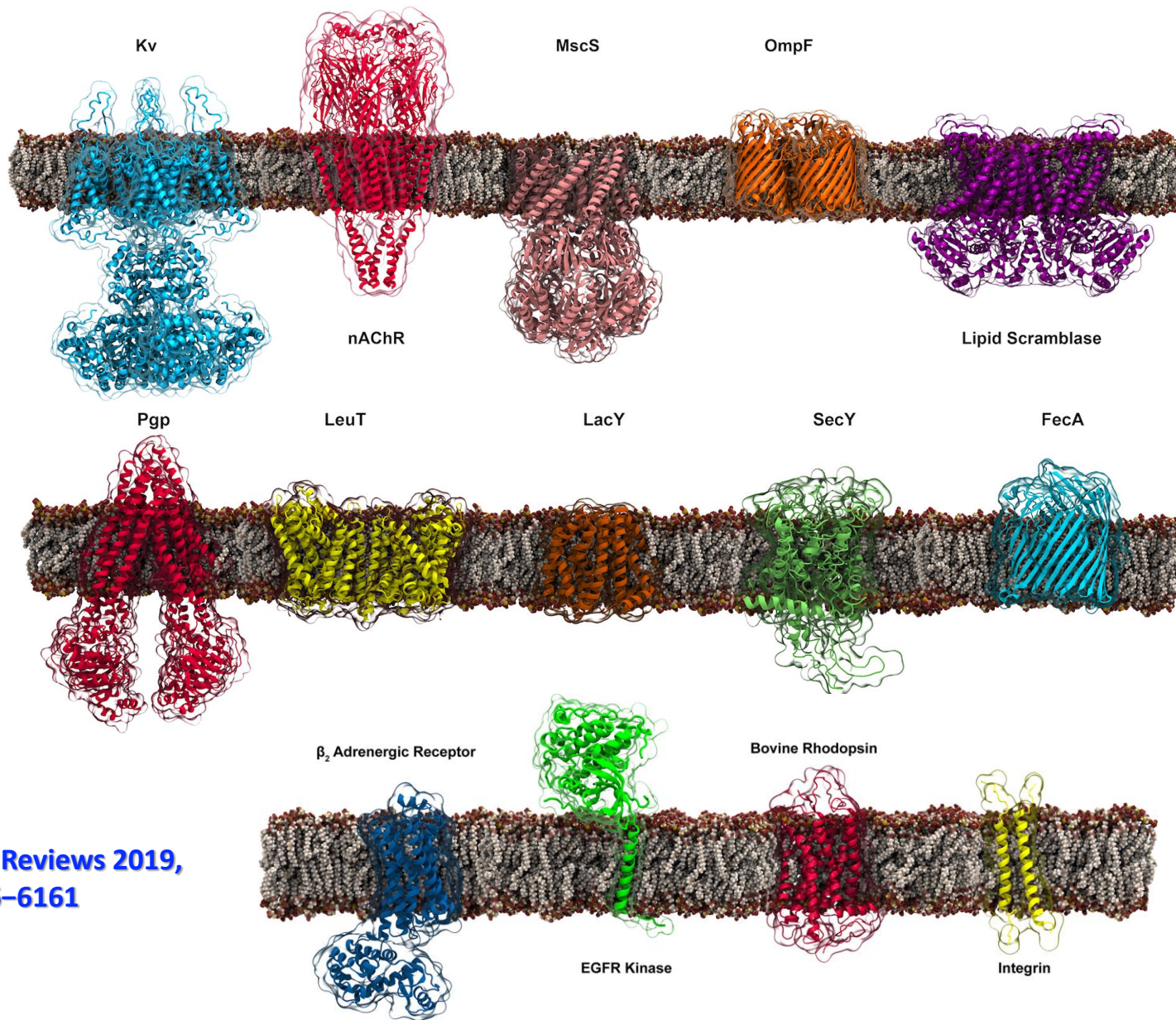
## Примеры теоретических моделей мембранных протеинов и белков



**Computational modeling of realistic cell membranes**

**S. J. Marrink, V. Corradi, P. C. T. Souza, H. I. Ingólfsson, D. P. Tieleman, M. S. P. Sansom**

**Chem. Rev. — 2019. — Vol. 119, № 9. — P. 6184-6226.**



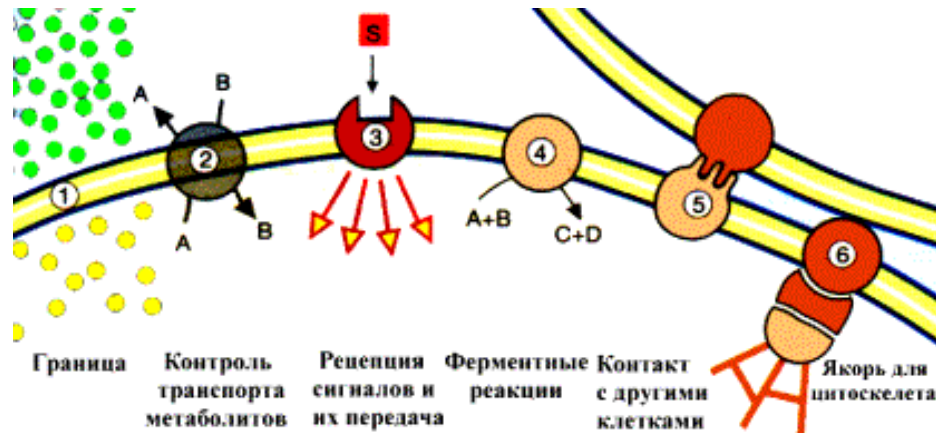
Chemical Reviews 2019,  
119, 6086–6161

# Мембранный транспорт

Все живые клетки отделены от окружающей среды поверхностью называемой **клеточной мембраной**.

Мембраны представляют собой не только статически организованные поверхности раздела, но и включают активные биохимические системы, отвечающие за такие процессы, как:

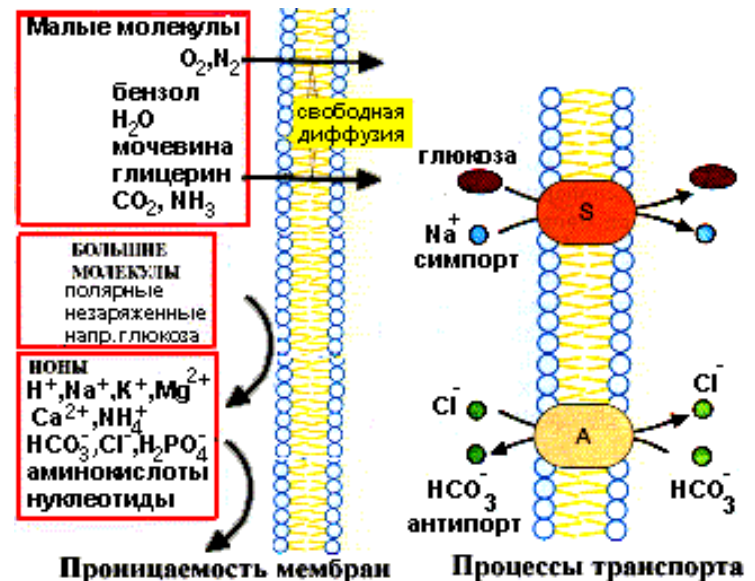
- избирательный транспорт веществ внутрь и наружу клетки
- связывание гормонов и других регуляторных молекул
- протекание ферментативных реакций
- передача импульсов нервной системы



# Мембранный транспорт

Транспорт веществ внутрь и наружу клетки обеспечивается мембранами. Если бы мембраны были глухим барьером, то внутриклеточное пространство оказалось бы недоступным для питательных веществ, а продукты жизнедеятельности не могли бы быть удалены из клетки. В то же время при полной проницаемости было бы невозможно накопление определенных веществ в клетке.

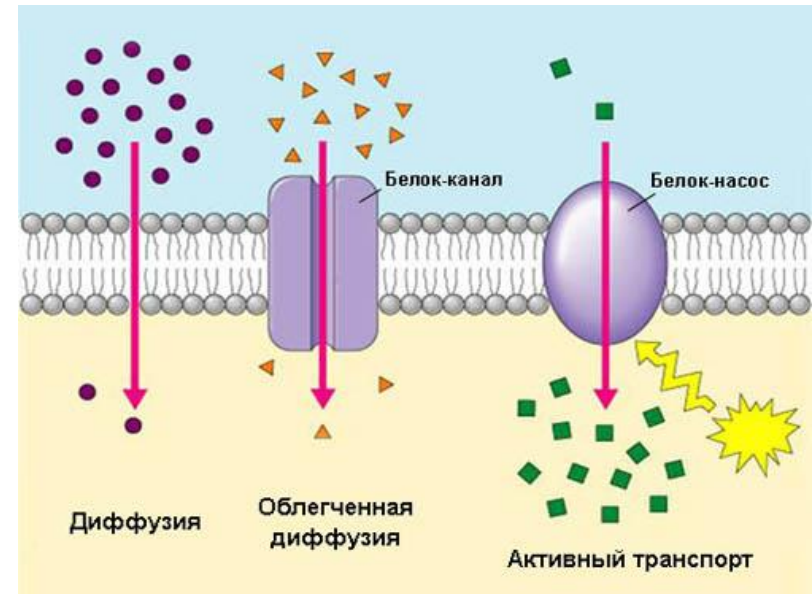
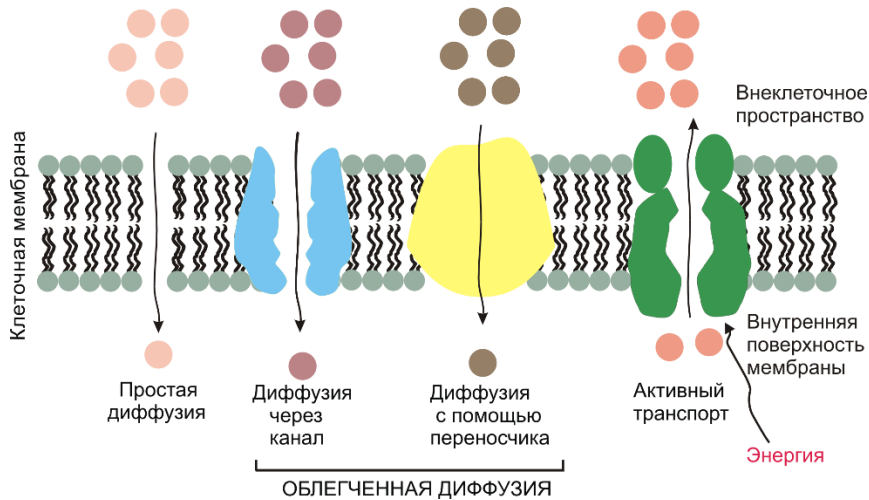
Транспортные свойства мембраны характеризуются **полупроницаемостью**: некоторые соединения могут проникать через нее, а другие — нет:



**Проницаемость мембран  
для различных веществ**

## Пассивный и активный транспорт через мембрану

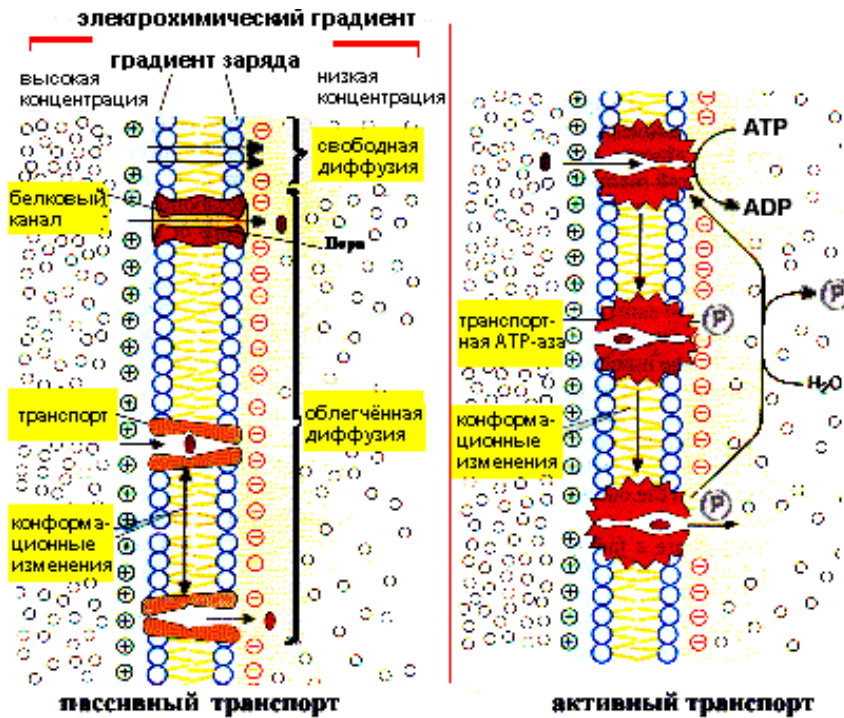
Одна из главных функций мембран — регуляция переноса веществ. Существуют два способа переноса веществ через мембрану: **пассивный** и **активный** транспорт:



**Транспорт веществ через мембраны**

## Пассивный и активный транспорт через мембрану

Одна из главных функций мембран — регуляция переноса веществ. Существуют два способа переноса веществ через мембрану: *пассивный* и *активный* транспорт:



**Поры** сформированы различными белками (порины, перфорины, аквапорины, коннексины), в некоторых случаях образуют гигантские комплексы (например, ядерные поры), состоящие из множества разных белков. Канал поры заполнен водой и всегда открыт.

**Транспорт веществ через мембраны**



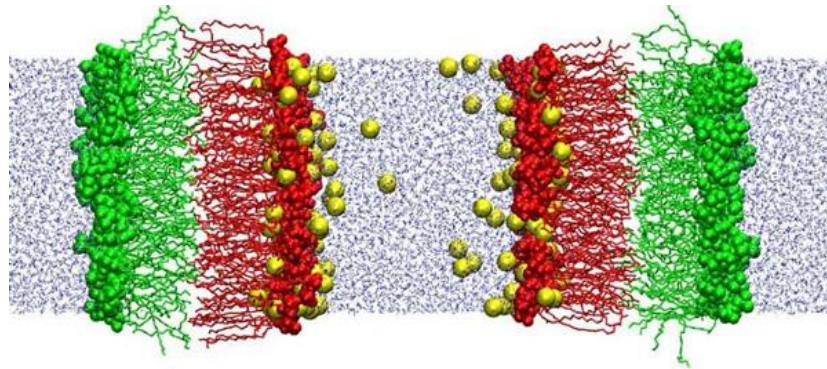
## Пассивный транспорт через мембрану

**Пассивный транспорт.** Если вещество движется через мембрану из области с высокой концентрацией в сторону низкой концентрации (т.е. по градиенту концентрации этого вещества) без затраты клеткой энергии, то такой транспорт называется пассивным, или **диффузией**.

Различают два типа диффузии: **простую** и **облегченную**.

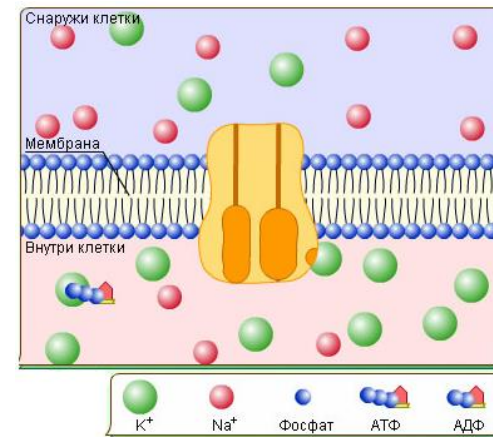
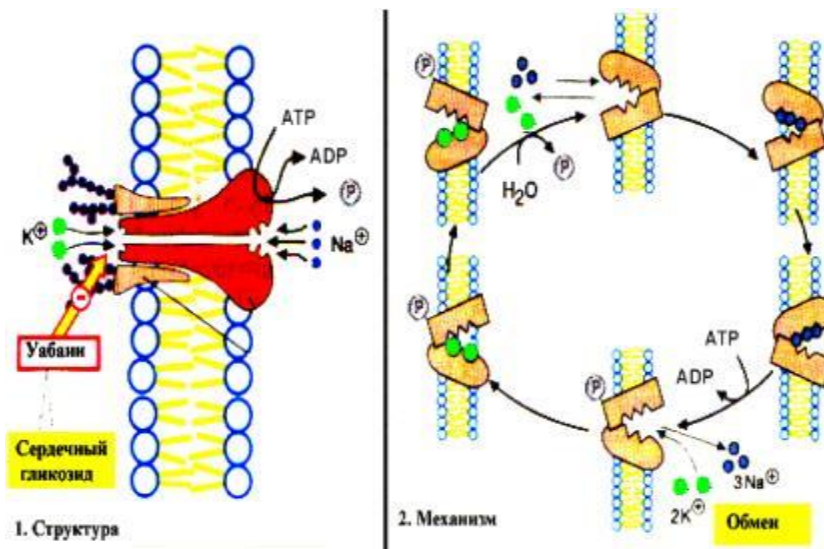
**Простая диффузия** характерна для небольших нейтральных молекул ( $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $O_2$ ), а также гидрофобных низкомолекулярных органических веществ. Эти молекулы могут проходить без какого—либо взаимодействия с мембранными белками через поры или каналы мембраны до тех пор, пока будет сохраняться градиент концентрации.

**Облегченная диффузия** характерна для гидрофильных молекул, которые переносятся через мембрану также по градиенту концентрации, но с помощью специальных мембранных белков — переносчиков. Для облегченной диффузии, в отличие от простой, характерна высокая избирательность, так как белок переносчик имеет центр связывания комплементарный транспортируемому веществу.



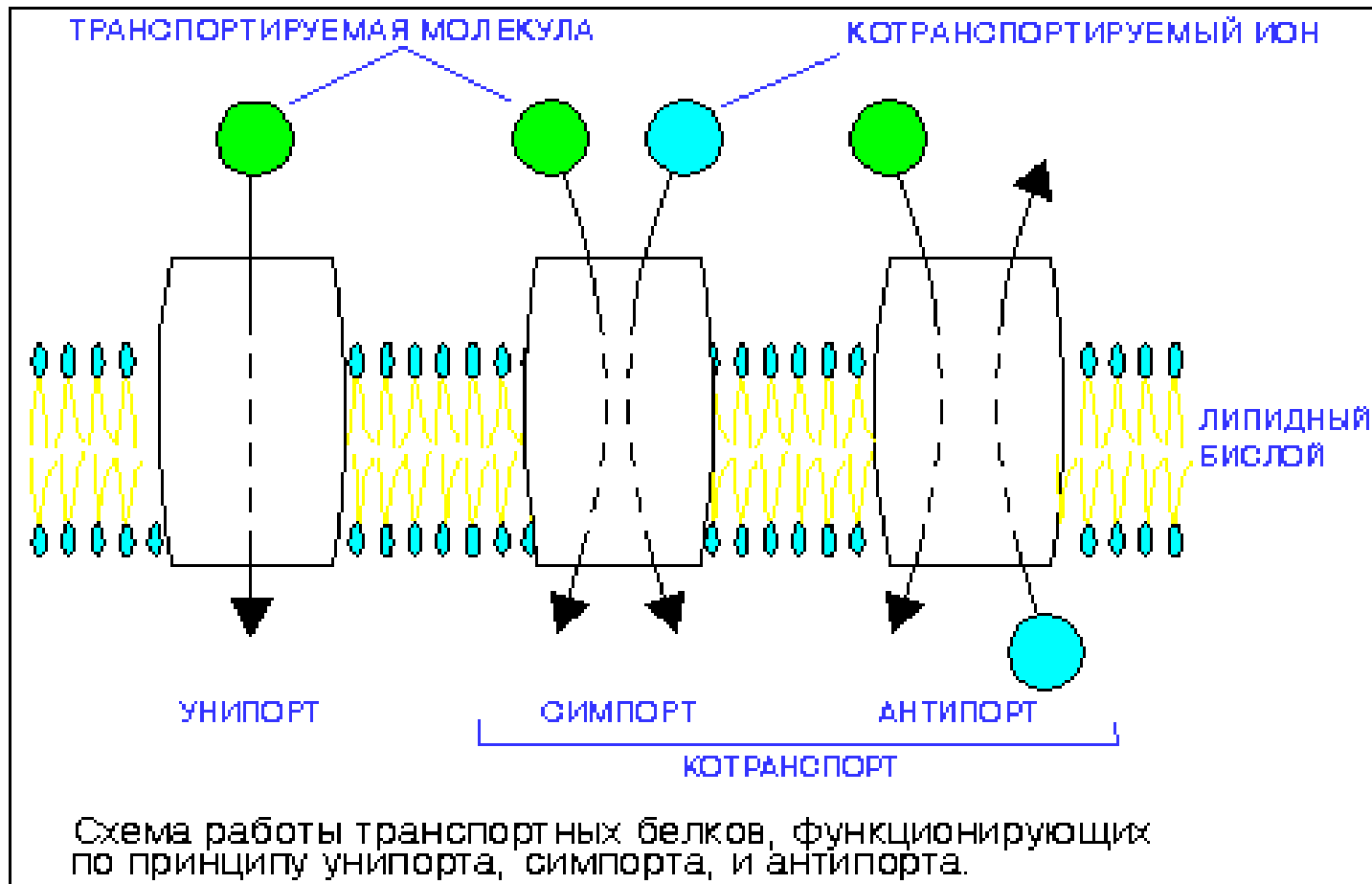
## Активный транспорт через мембрану

**Активный транспорт** имеет место в том случае, когда перенос осуществляется против градиента концентрации. Такой перенос требует затраты энергии клеткой. Активный транспорт служит для накопления веществ внутри клетки. Источником энергии часто является АТФ. Для активного транспорта кроме источника энергии необходимо участие мембранных белков. Одна из активных транспортных систем в клетке животных отвечает за перенос ионов  $\text{Na}^+$  и  $\text{K}^+$  через клеточную мембрану. Эта система называется  $\text{Na}^+ - \text{K}^+$  — насос. Она отвечает за поддержание состава внутриклеточной среды, в которой концентрация  $\text{K}^+$  выше, чем  $\text{Na}^+$  :

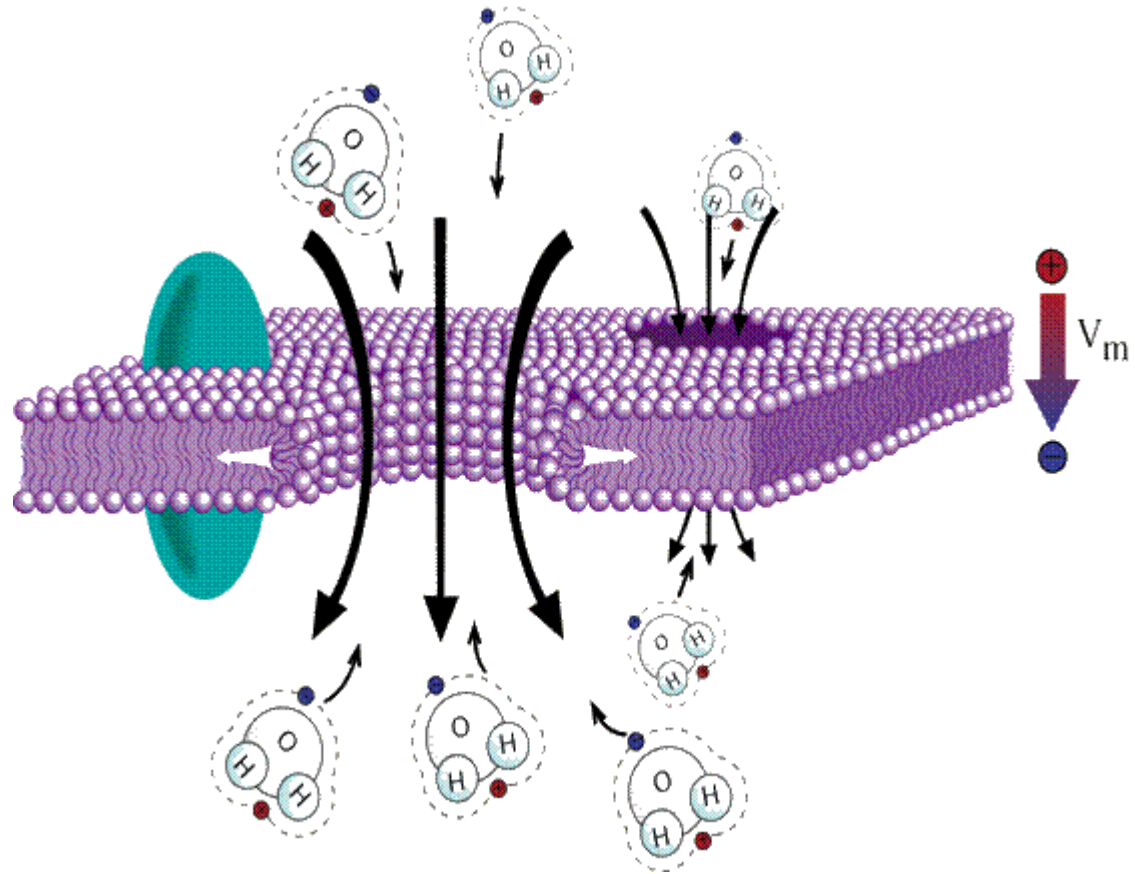


**Калий - натриевый насос**

# Активный транспорт через мембрану



# Активный транспорт через мембрану



## Рекомендуемая литература

[1]. A computer perspective of membranes: Molecular dynamics studies of lipid bilayer systems / Tieleman D. P., Marrink S. J. and Berendsen H. J. C. // *Biochim Biophys Acta Rev Biomembr.* — 1997. — V. 1331, № 3. — P. 235-270.

[2] Martinez-Seara H. and Róg T., Molecular dynamics simulations of lipid bilayers: Simple recipe of how to do it, *in Biomolecular simulations*, L. Monticelli and E. Salonen, Editors. 2013, Humana Press. p. 407-429.

[3]. Computer simulations of transport through membranes: Passive diffusion, pores, channels and transporters / Tieleman D. Peter // *Proc. Australian Physiol. Soc.* — 2006. — V. 37, — P. 15-27.

[4]. The importance of membrane defects—lessons from simulations / Bennett W. F. D. and Tieleman D. P. // *Acc. Chem. Res.* — 2014. — V. 47, № 8. — P. 2244-2251.

