

# Исследование структуры бицелл методом малоуглового рассеяния

Селиверстова Д.В.<sup>1,2</sup>, Иванов А.И.<sup>2,3,4,5</sup>, Соловьев Д.В.<sup>2,3,4,5</sup>, Горделий В.И.<sup>2,3</sup>, Булавин Л.А.<sup>4,5</sup>, Куклин А.И.<sup>2,3</sup>, Муругова Т.Н.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Государственный университет «Дубна», г.Дубна, Россия

<sup>2</sup>Объединенный институт ядерных исследований, г.Дубна, Россия

<sup>3</sup>Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Россия

<sup>4</sup>Киевский национальный университет им. Т. Шевченко, г.Киев, Украина

<sup>5</sup>Институт проблем безопасности атомных электростанций, г.Киев, Украина

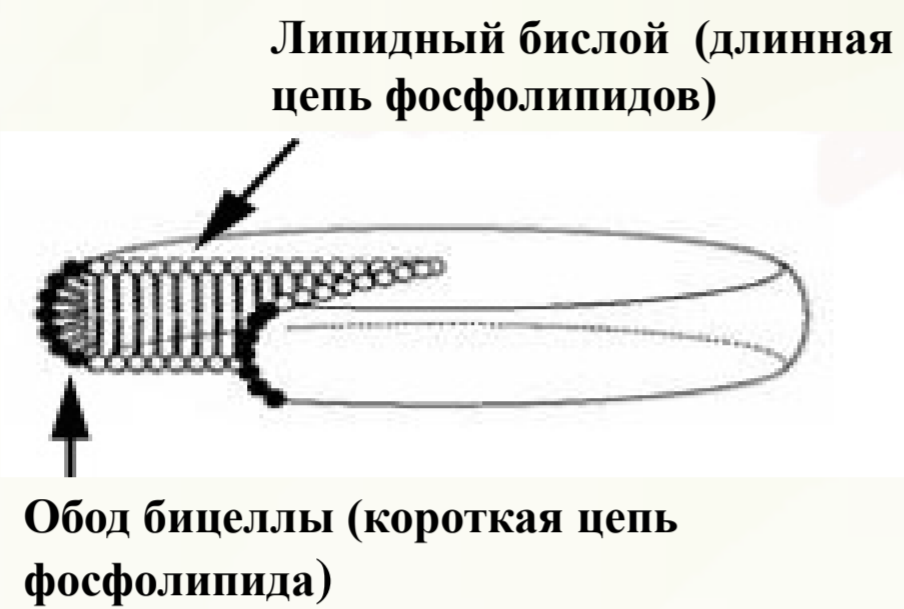
seliworstowa.daria@yandex.ru

В работе представлены результаты эксперимента по методу малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР) и нейтронов (МУРН) на бицеллярных системах с целью исследования изменения параметров бицелл в процессе кристаллизации мембранных белков. Измерения были проведены на образцах с молярным отношением ДМФС/СНАПСО=2.7, разной концентрацией липидов и состава буфера при разной температуре. Эксперименты показали изменение структурных характеристик бицелл как с изменением концентрации липидов и состава буфера, так и с течением времени.

**Бицеллы** - дискообразные наноструктуры, в которых длинная цепочка фосфолипида образует плоский бислой, а короткая цепь фосфолипида стабилизирует край структуры.

## Применение:

- Моделирование биологических мембран
- Солюбилизация (растворении) мембранных белков
- Кристаллизация мембранных белков

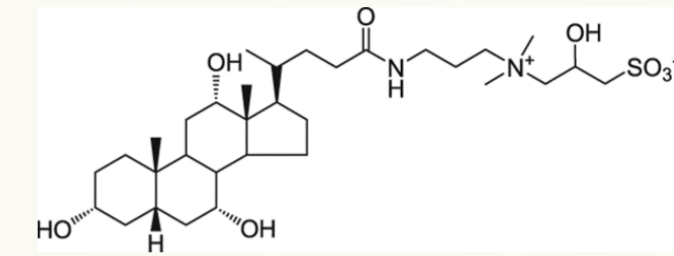
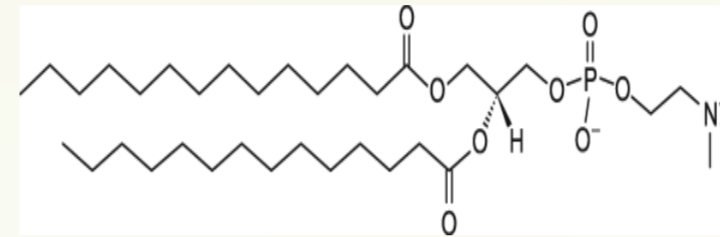


## Объект исследования:

ДМФС/СНАПСО + D2O (H2O) + буфер

ДМФС - C<sub>30</sub>H<sub>72</sub>N<sub>8</sub>O<sub>8</sub>P -  
1,2-димиристоилглицеро-3-фосфохолин

СНАПСО - C<sub>32</sub>H<sub>58</sub>N<sub>2</sub>O<sub>8</sub>S -  
3-[(3-Холамидопропил)диметиламмоний]-2-гидрокси-1-пропансульфонат



C%
35
15.6
10
7.5
5.6

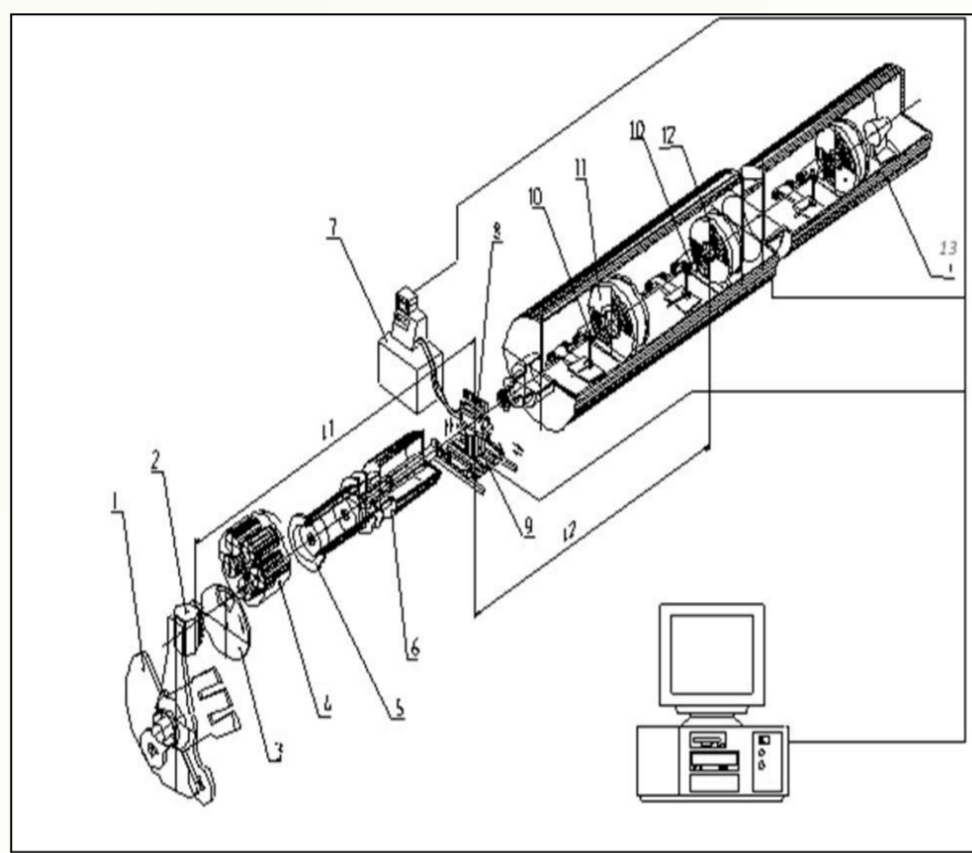
$$q = \frac{\text{липид с длин. хвостом}}{\text{липид с корот. хвостом}} = 2.7$$

T°C: 7, 20, 32, 45, 32

Установка МУРР Rigaku (МФТИ, г. Долгопрудный)



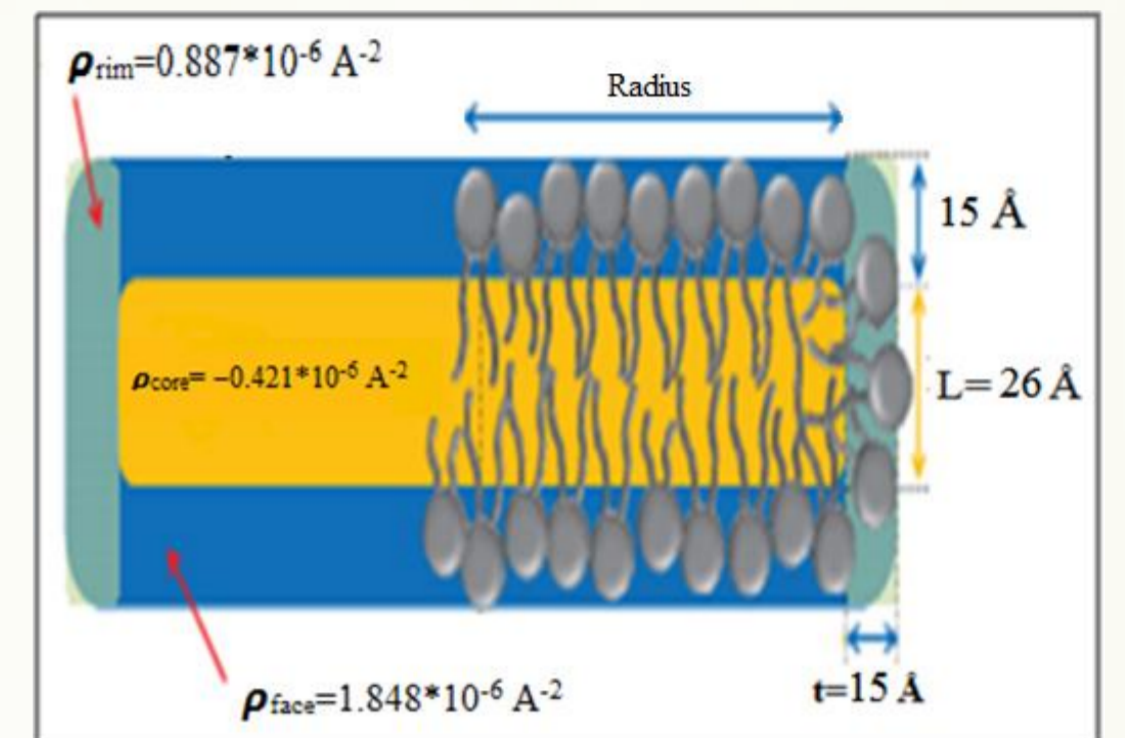
Установка МУРН спектрометр ЮМО (ОИЯИ, г. Дубна)



Расчетные плотности рассеяния буфера для приготовленных образцов

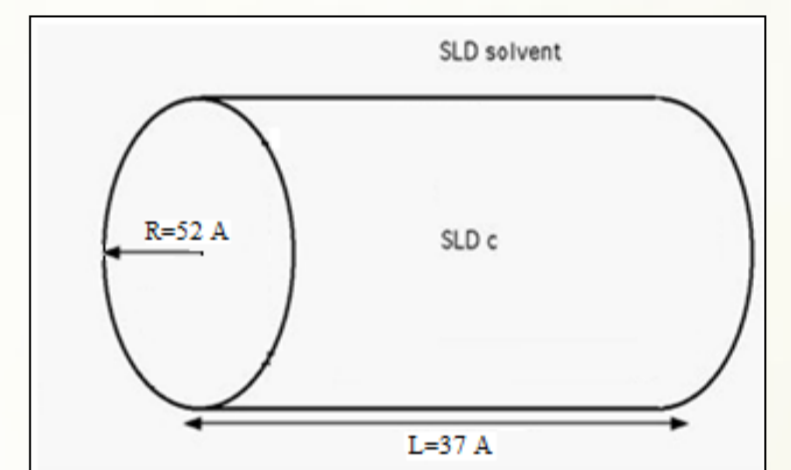
C %	МУРР $\rho_{\text{рассеяния}} \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$	МУРН $\rho_{\text{рассеяния}} \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$
15.6	10.48	6.13
10	10.11	6.18
7.5	9.94	6.23
5.6	9.81	6.26
H2O	9.47	-0.56
D2O	9.37	6.33

Расчетные параметры модели бицеллы для аппроксимации данных МУРН



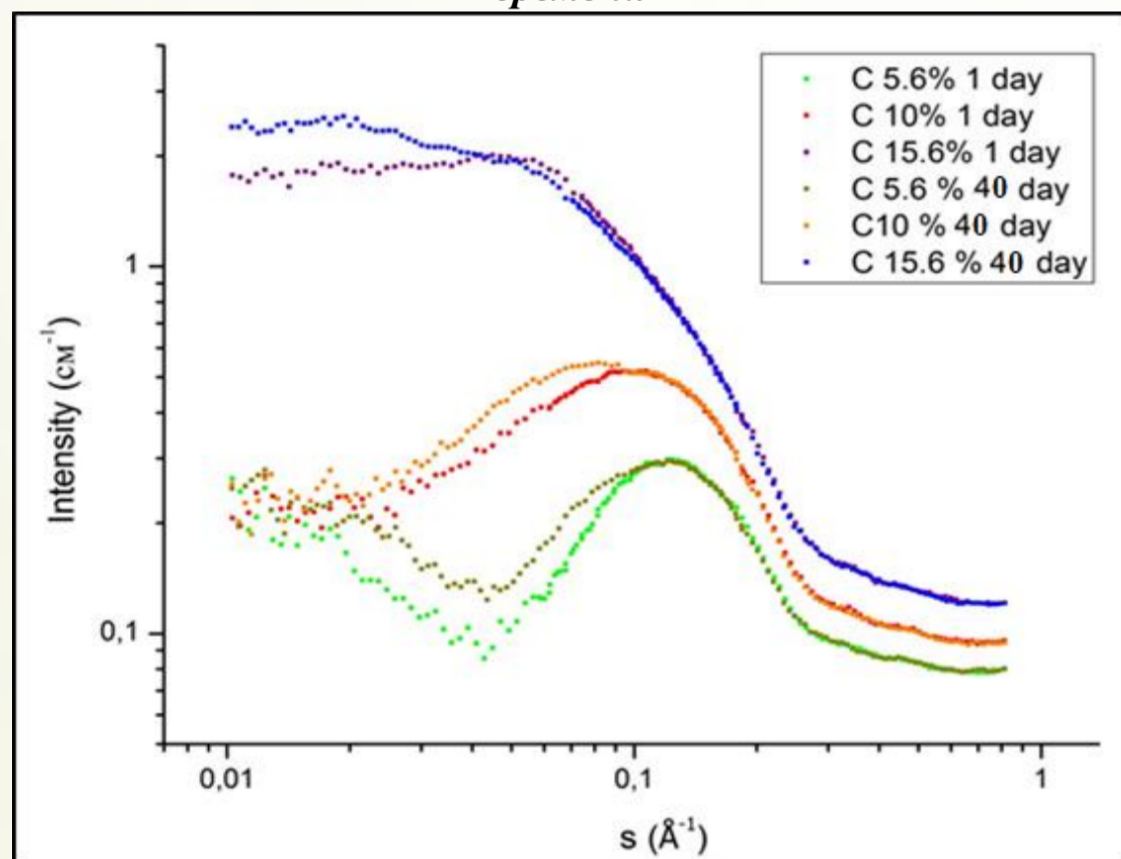
Для МУРР кривые рассеяния были аппроксимированы моделью бицелл: фитировали радиус бицелл, а другие параметры (плотность рассеяния и толщина гидрофобной и гидрофильной части бицеллы) были теоретически рассчитаны и фиксированы.

Модель цилиндра

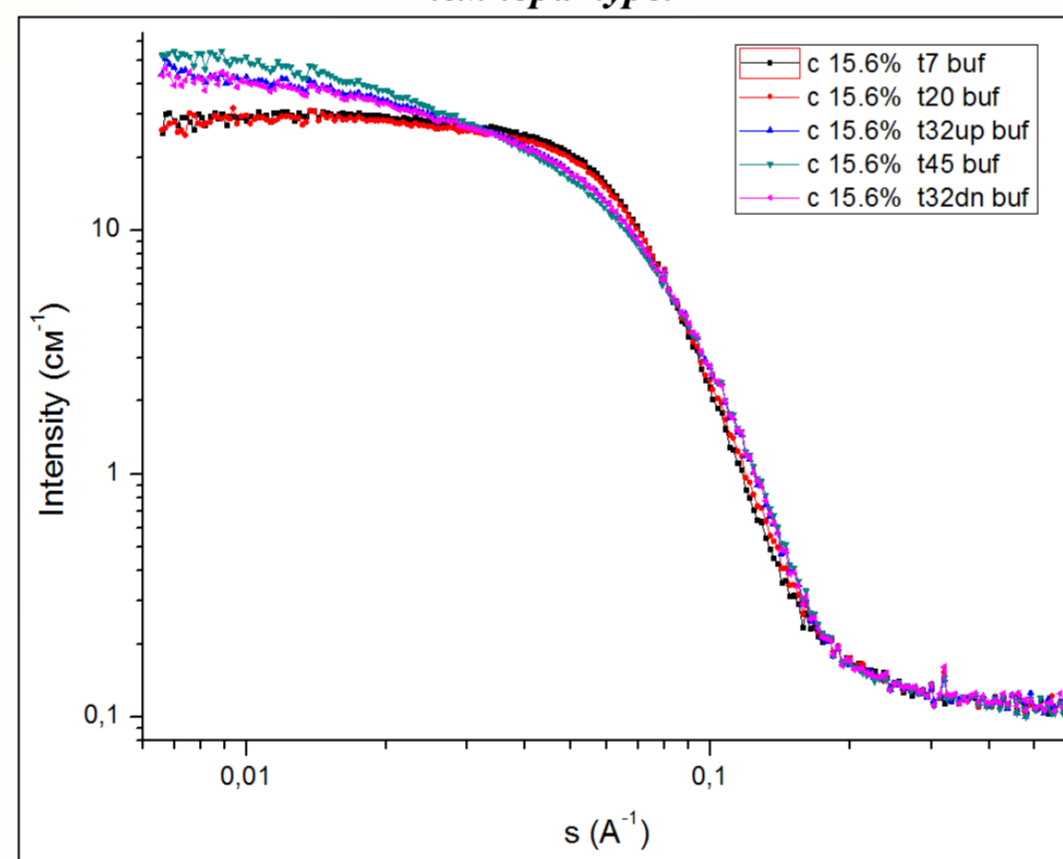


Для МУРН кривые рассеяния были аппроксимированы моделью цилиндра: фитировали радиус и длину цилиндра

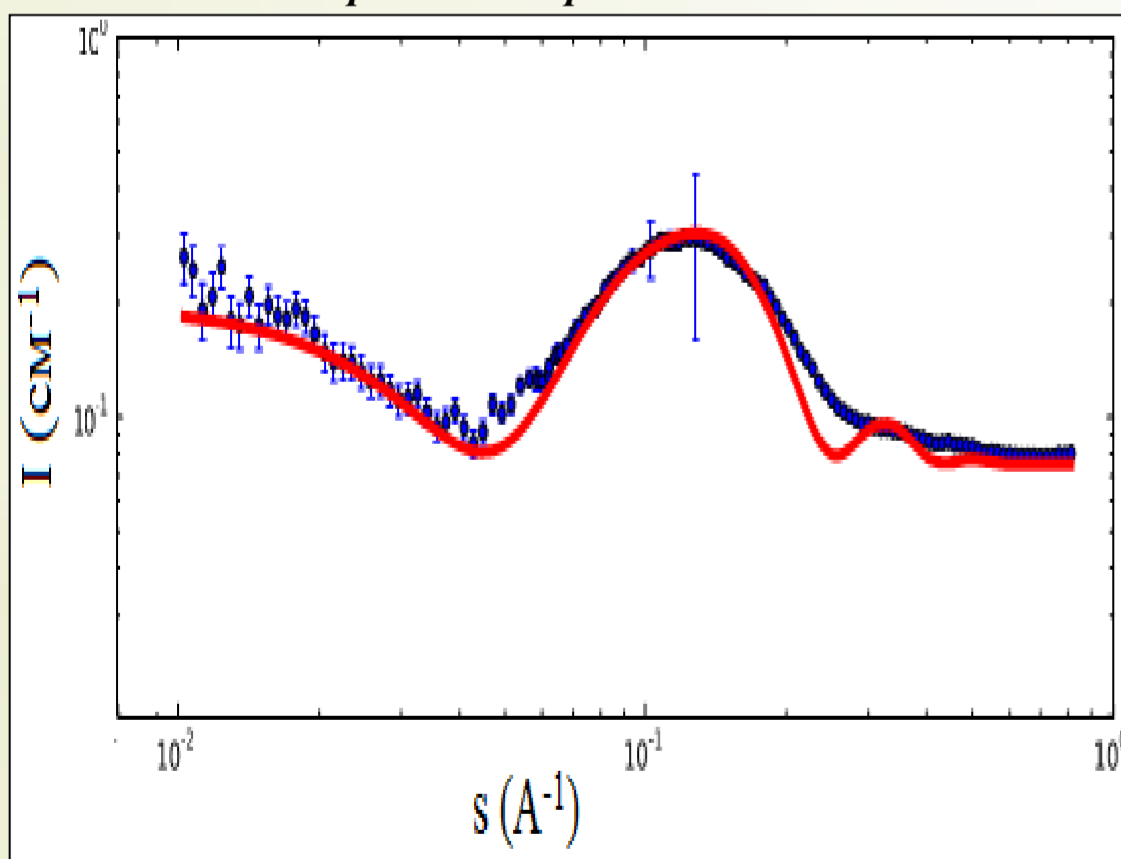
Кривые рассеяния бицелл МУРР в буфере в зависимости от концентрации (C) и с течением времени



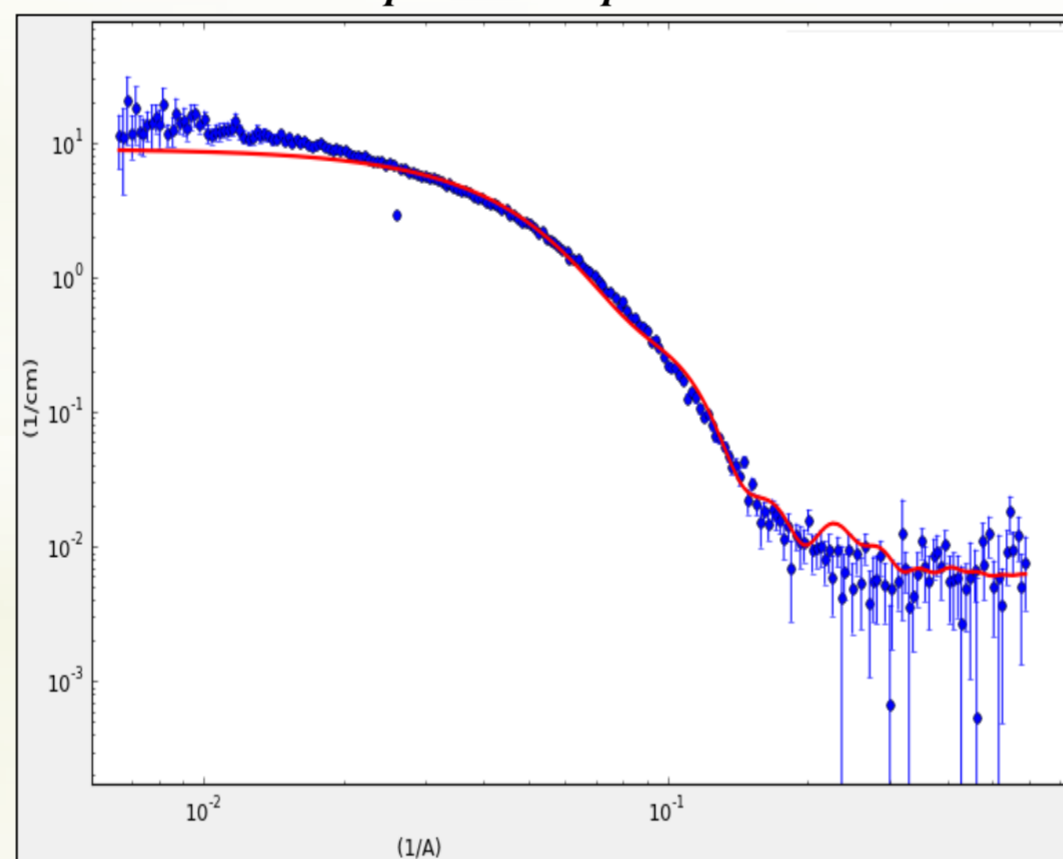
Кривые рассеяния бицелл МУРН в буфере с концентрацией (C) 15.6% в зависимости от температуры



Аппроксимация кривой рассеяния МУРР функцией бицелл для концентрации C=5.6% при t=20°C через 1 день приготовления



Аппроксимация кривой рассеяния МУРН функцией цилиндр для концентрации C=5.6% при t=20°C через 1 день приготовления



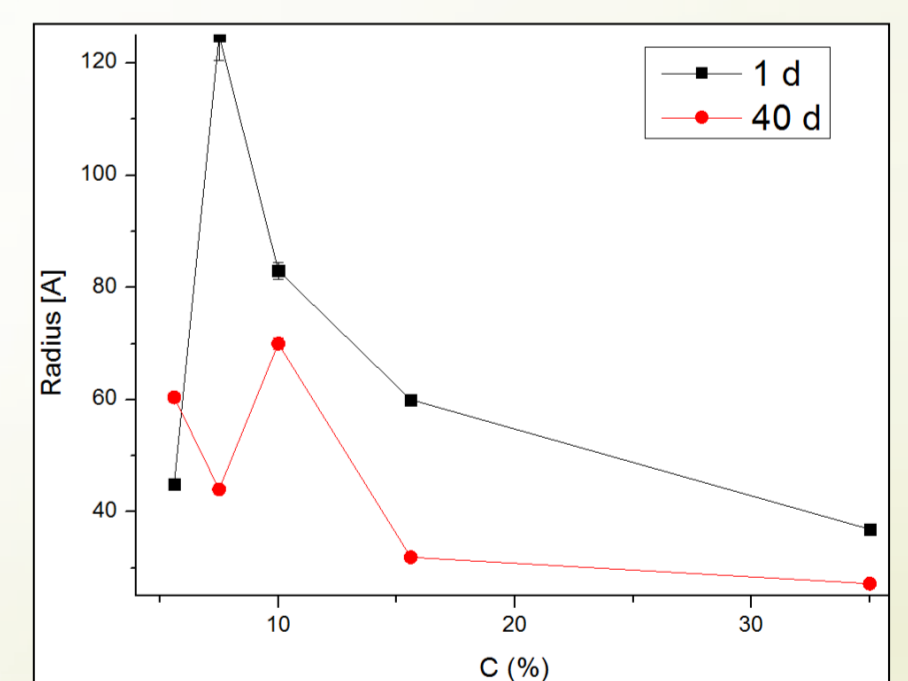
Кюветы с образцами для спектрометра ЮМО



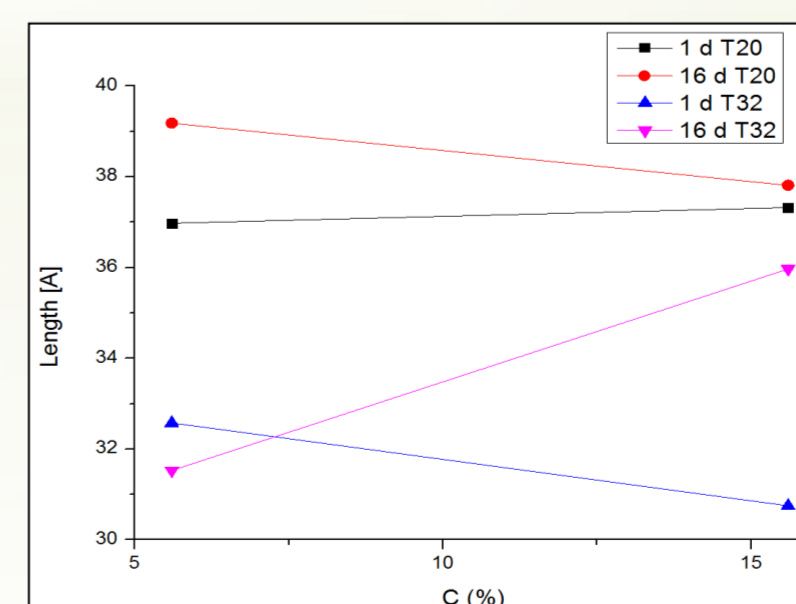
Капилляры с образцами в камере (установка Rigaku)



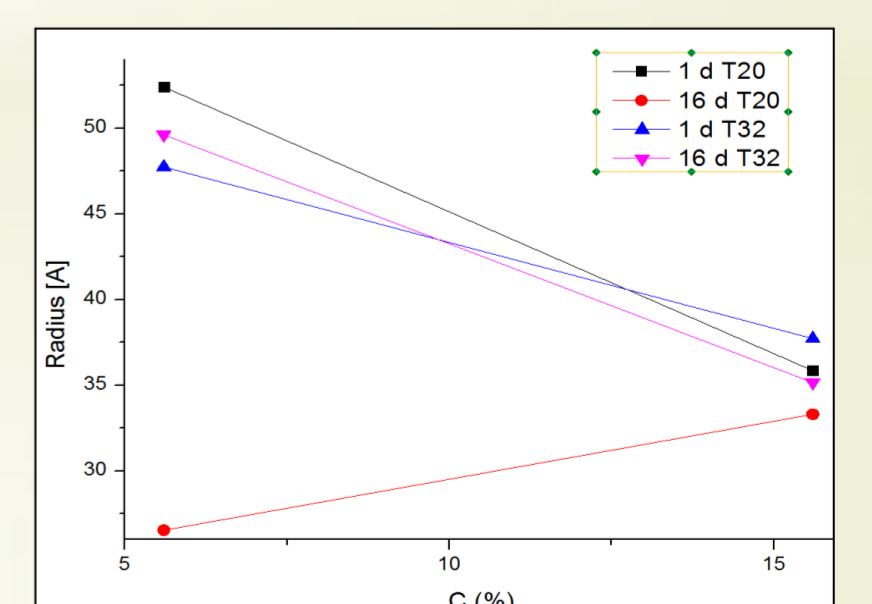
МУРР. График изменения радиуса бицелл в зависимости от концентрации через 1 день и 40 дней после приготовления образца.



МУРН. График изменения длины цилиндра в зависимости от концентрации. При температуре 20 и 32°C через 1 и 16 дней после приготовления образца



МУРН. График изменения радиуса цилиндра в зависимости от концентрации. При температуре 20 и 32°C через 1 и 16 дней после приготовления образца



Фитирование кривых МУРР. Сравнение значений радиусов бицелл через 1 день и 40 дней после приготовления

C %	1 день		40 дней	
	Radius [A]	err R [A]	Radius [A]	err R [A]
5.6	45	0.4	60.4	0.8
7.5	124.9	4.4	44	0.3
10	83	1.5	70	1
15.6	60	0.5	31.9	0.1
35	36.9	0.1	27.2	0.04

Фитирование кривых МУРН функцией цилиндр. Полученные значения длины и радиуса цилиндров

Образец	Length [A]	err L [A]	Radius [A]	err R [A]
C 5.6% T20 1d	37.0	0.2	52.0	0.2
C 5.6% T32 1d	32.6	0.2	47.7	0.2
C 15.6% T20 1d	37.3	0.2	35.9	0.1
C 15.6% T32 1d	30.8	0.2	37.7	0.1
C 5.6% T20 16d	39.2	0.3	26.6	0.2
C 5.6% T32 16d	31.5	0.2	49.6	0.3
C 15.6% T20 16d	37.8	0.1	33.31	0.06
C 15.6% T32 16d	36.0	0.1	35.2	0.1

Работа была поддержана Министерством образования и науки РФ. Авторы благодарны программе «5 Top 100»

## Список литературы:

- 1) Lucyanna Barbosa-Barros, Gelen Rodríguez, Mercedes Cócera, Laia Rubio, Joan Estelrich, Alfonso de la Maza and Olga López «Bicelles: New nano systems for skin applications», Barcelona, Spain, 2012г.
- 2) C. Sanders, S. Prosser «Bicelles: a model membrane system for all seasons?»// Structure - 1998. - V. 6 - P. 1227-1234
- 3) Д.И. Свергун, Л.А. Фейгин «Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние» Москва «Наука» 1986г.
- 4) SasView, <http://www.sasview.org/>