

Årlige højdepunkt Scrima S, et al. *Comput Struct Biotechnol J*, 2022

Cellemembraner er barrierer, der omkranser celler samt de forskellige strukturer inde i cellen (subcellulære membraner). De fungerer som "grænser", som styrer strømmen af materiale, herunder lægemidler, og information mellem cellens bestanddele, og spiller en vigtig rolle i adskillige cellulære funktioner. Membraner består hovedsageligt af en blanding af lipider (fedtstoffer), som varierer alt efter den specifikke type af membran. Væsentligt er det at ændringer i membraners lipidsammensætning er blevet kædet sammen med kræft. Membraner indeholder også specifikke proteiner, cellulære aktører, der udfører specifikke funktioner i cellen, og hvis ydeevne og egenskaber afhænger af membranen, de sidder i. Desværre er der ikke megen information om den præcise sammensætning af disse subcellulære membraner, og vi ved ikke, hvorledes deres sammensætning påvirker deres funktion. For at få en bedre forståelse af, hvordan membransammensætningen bidrager til cellulære processer og kræft, benytter vi os af både eksperimenter og computersimuleringer. Eksperimenter giver os viden om, hvilke typer lipider forskellige membraner er lavet af, mens simuleringer bruges til at undersøge de konsekvenser som sammensætningen har på formen, tykkelsen og andre egenskaber ved cellemembraner. Dette hjælper os til at forstå, hvordan membraner adskiller sig mellem raske og kræftceller, eller er påvirket af lægemidler. For at få mest ud af simuleringerne har vi udviklet et software kaldet LipidDyn. Dette program forbedrer vores evne til at designe computersimuleringer af cellulære membraner med bestemte lipidsammensætninger, så vi kan simulere forskellige typer membraner. Dette gør det for eksempel muligt at simulere membraner fra raske celler eller kræftceller. Vi bruger det også til at tolke vores resultater og udtrække relevant information om, hvordan membranerne opfører sig i simuleringen. For eksempel kan LipidDyn give information om form, tykkelse og stivhed af membranerne. Disse egenskaber er alle vigtige for at forstå, hvordan lipidsammensætningen påvirker membranernes opførsel. Vi kan også bruge LipidDyn til at studere, hvordan membranen og proteiner indlejret deri påvirker hinanden. Vi har for eksempel brugt LipidDyn til at undersøge: i) virkningen af kræftlægemidler på lysosomale membraner og enzymer; ii) ændringerne i membraner som følge af ændringer i kosten; og iii) lipid-transportmekanismerne, der styrer formen og sammensætningen af membraner. LipidDyn er under aktiv udvikling og frit tilgængelig; hvis du er nysgerrig efter at have et kig på vores kode, kan du udforske den på <https://github.com/ELELAB/LipidDyn>.

