

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛИПИДНЫХ БИСЛОЕВ: ОРИЕНТАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА СВЯЗЕЙ В ЖИРНОКИСЛОТНЫХ ЦЕПЯХ МОЛЕКУЛ ЛИПИДОВ (МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ)

¹Рабинович А.Л., ²Lyubartsev A.P.

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биологии Карельского научного центра Российской академии наук, г. Петрозаводск

²Department of Material and Environmental Chemistry, Stockholm University, Stockholm

¹Рабинович А.Л.
²Lyubartsev A.P.
¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биологии Карельского научного центра Российской академии наук
²Department of Material and Environmental Chemistry, Stockholm University

Метод молекулярной динамики (МД) широко используется для моделирования липидных мембранных систем [1]. В настоящей работе методом МД при температуре $T = 303$ К исследованы свойства гомогенных гидратированных липидных бислоев, образованных молекулами фосфатидилхолинов (ФХ) различного строения. Каждая липидная молекула содержала две углеводородных цепи: цепь пальмитиновой или стеариновой кислоты (т.е. насыщенную цепь) в положении *sn*-1, и цепь олеиновой, линолевой, линоленовой, стеаридоновой, октадекапентаеновой, арахидоновой, эйкозапентаеновой или докозагексаеновой кислоты (т.е. ненасыщенную цепь, содержащую от 1 до 6 двойных связей цис) в положении *sn*-2.

В расчетной ячейке бислоя в МД экспериментах содержалось по 128 молекул липида данного типа и 3840 молекул воды. Химическое строение липидных молекул воспроизведено строго, атомы водорода учтены явно. Параметры силового поля для расчета энергии соответствовали набору CHARMM27, в который были введены поправки согласно работе [2]. Моделирование осуществлено с помощью пакета программ MdynaMix v.5.2. Длина траектории каждого бислоя составляла 100 нс, из которых первые 20 нс считали участками релаксации. Запись конфигураций осуществляли с интервалом 1 пс. В итоге моделирования рассчитаны и проанализированы различные физические характеристики 16 бислоев, в том числе функции распределения векторов-связей C-C и C-H по ориентациям относительно нормали *Z* к поверхности каждого из бислоев.

Показано, что можно провести *общую классификацию* связей (как C-C, так и C-H) в цепях липидов по форме их функций распределения, т.е. по характеру их упорядочения в бислоях. Все функции распределения можно разделить на группы качественно однотипных функций, и соотнести эти группы (типы) с определенными местоположениями связей в углеводородных цепях разной степени ненасыщенности. Это позволило выявить сходства и различия между разными участками цепей в молекулах липидов согласно физической картине упорядочения связей в мембранных структурах, а также сравнить эти данные с параметрами порядка связей относительно нормали *Z*. Наличие двойных связей в цепи существенно меняет характер флуктуаций всех связей по сравнению с таковым в насыщенной цепи. Выделены особые свойства полиненасыщенных цепей липидов и обсуждены фундаментальные причины их существования. Результаты способствуют дальнейшему углублению знаний о физических основах функционирования липидных мембран [3].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 10-03-00201а), программы Президента РФ “Ведущие научные школы” НШ-1642.2012.4.

Литература

1. Lyubartsev A.P., Rabinovich A.L. Recent Development in Computer Simulations of Lipid Bilayers // *Soft Matter*. 2011. V.7. P.25-39.
2. Högborg C.-J., Nikitin A.M., Lyubartsev A.P. Modification of the CHARMM Force Field for DMPC Lipid Bilayer // *J. Comput. Chem.* 2008. V.29. No.14. P.2359-2369.
3. Рабинович А.Л. Цепные молекулы как компоненты мембранных систем: компьютерное моделирование // В кн.: Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров. Отв. ред. В.А. Иванов, А.Л. Рабинович, А.П. Хохлов. М.: Книжный дом “ЛИБРОКОМ”. 2009. С.409-454.