

НЕНАСЫЩЕННЫЕ ЦЕПИ ЛИПИДОВ БИОМЕМБРАН – СТРУКТУРА, СВОЙСТВА, ФУНКЦИИ: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Рабинович А.Л.

Институт биологии Карельского научного центра РАН, г.Петрозаводск

Рабинович А.Л.
Институт биологии
Карельского научного
центра РАН

Основу биомембран образуют молекулы фосфолипидов. Углеводородные цепи последних различаются по числу углеродных атомов, количеству двойных связей и их конфигурации; при этом широко отмечается, что ненасыщенные углеводородные цепи имеют важнейшее значение для функционирования мембран (см. обзоры в [1, 2]). Актуальной задачей является поиск взаимосвязей между микроструктурой и свойствами молекулярных компонентов мембран в различных условиях: можно ожидать, что эти данные позволят осуществлять направленное воздействие на свойства мембран, дадут импульс развитию соответствующих областей науки и биотехнологии; на этом же пути может быть достигнуто понимание функциональной роли цепей молекул липидов различной структуры.

Извлечь информацию о свойствах молекулярных систем, подчас уникальную по степени детальности и едва ли достижимую в физическом эксперименте, позволяет компьютерное моделирование (проводимое, в частности, методами Монте-Карло, МК, и молекулярной динамики, МД). К настоящему времени компьютерное моделирование упрочилось как парадигма, как мощный общепризнанный инструмент изучения свойств объектов различной природы, хотя структура и функционирование реальных объектов существенно сложнее тех молекулярных моделей, которые пока используются.

В настоящей работе рассмотрены проблемы установления связей “структура – свойства – функции” для углеводородных цепей липидов разной степени ненасыщенности. Конкретные пути осуществления замен липидных цепей того или иного строения на другие в природной мембране, которые наблюдаются при изменении условий среды, сопряжены с комплексом сложнейших биохимических процессов, и в настоящее время прямому компьютерному моделированию не поддаются. Поэтому представляется разумным судить о функциях той или иной углеводородной цепи в мембране по степени соответствия известных к настоящему времени физических свойств цепи определенной (“рабочей”) гипотезе; это либо способствует обоснованию конкретных гипотез, либо сужает их круг.

Взаимосвязи между структурой и свойствами цепей были выявлены при моделировании изолированных липидных цепей разной длины и степени ненасыщенности и бислойных липидных кластеров с помощью методов МК и МД. При температурах выше температуры фазового перехода гель – жидкий кристалл T_c в цепях изучено ориентационное упорядочение простых связей С-С, соседних с двойными С=C, угловые флуктуации связей С-Н во всех CH_2 -группах вдоль по цепи, пространственные флуктуации атомов С двойных связей, гибкость большой совокупности цепей в целом и их отдельных участков, температурные коэффициенты размеров молекул; при температурах ниже T_c – преимущественные конформации цепей. Полученные данные позволяют затронуть вопросы о корреляциях между совокупностью известных свойств различных цепей липидов и жидкостностью мембран, а также о функциях липидов, образующих микроокружение интегральных белков [3].

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект 06-03-32211, и гранта Президента РФ для ведущих научных школ, НШ-306.2008.4.

Литература

1. *Rabinovich A.L., Ripatti P.O., Balabaev N.K., Leermakers F.A.M.* // Physical Review. E. 2003. V.67. No. 1. P. 011909_1-011909_14.
2. *Рабинович А.Л., Рипатти П.О.* // Успехи совр. биологии. 1994. Т. 114. № 5. С. 581-594.
3. *Рабинович А.Л.* // Биофизика. 2008. Т. 53. Вып. 3. С.