

ВЛИЯНИЕ КОЛИЧЕСТВА ДВОЙНЫХ СВЯЗЕЙ В ЦЕПЯХ МОЛЕКУЛ ФОСФОЛИПИДОВ НА СВОЙСТВА ГИДРАТИРОВАННЫХ ЛИПИДНЫХ БИСЛОЕВ: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

¹Рабинович А.Л., ²Любарцев А.П.

¹Учреждение Российской академии наук Институт биологии Карельского научного центра РАН, г. Петрозаводск

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

¹Рабинович А.Л.

²Любарцев А.П.

¹Учреждение Российской академии наук Институт биологии Карельского научного центра РАН

²Department of Materials and Environmental Chemistry, Stockholm University

В организации и функционировании биологических мембран важнейшую роль играют углеводородные цепи липидов, содержащие двойные связи, т.е. цепи ненасыщенные. Молекулы фосфолипидов образуют бислои, - основу мембран. Исследования свойств мембран проводятся широко и всесторонне, но понимание молекулярных механизмов функционирования липидов, понимание взаимосвязи между химическим строением липидов и их физическими свойствами на сегодня нельзя считать удовлетворительным. В настоящей работе методом молекулярной динамики в полноатомном приближении смоделирована в жидкокристаллическом состоянии совокупность бислоев, образованных молекулами фосфатидилхолинов (ФХ) разного строения. Одна из двух углеводородных цепей липидной молекулы каждого бислоя была насыщенной (16 или 18 атомов углерода), а вторая – ненасыщенной (18, 20 или 22 атома углерода). Количество двойных связей *cis* в этой цепи варьировали от 1 до 6. Столь большая совокупность бислоев (всего рассмотрено 16 бислоев) в единых условиях изучена впервые.

В каждом из них исследован ряд свойств молекул липидов, отражающих конформационные, геометрические особенности. Вычислены такие характеристики (традиционно актуальные для мембранных систем) как параметры порядка каждой связи С-С и С-Н цепей относительно нормали к поверхности каждого бислоя, параметры порядка связей головных групп липидов, функции распределения по ориентациям каждой связи. Кроме того, изучены среднеквадратичные пространственные тепловые флуктуации (вдоль нормали к поверхности бислоя) всех атомов относительно своих равновесных положений.

Выявлено, что для некоторых двойных связей встречаются нарушения “С=C”-эффекта: такие двойные связи расположены либо очень близко к группам С=О цепей (т.е. к полярной головной группе липидов), - в области, где флуктуации двойных связей, по-видимому, более затруднены, чем флуктуации связей простых, либо вблизи конца насыщенной цепи *sn*-1 в тех случаях, когда ненасыщенная цепь *sn*-2 липидной молекулы является более длинной (содержит большее количество атомов углерода), чем цепь *sn*-1.

Проведена аппроксимация функций распределения векторов-связей по ориентациям и установлены соотношения между характеристиками функций распределения и типом (простая или двойная), расположением каждой связи в цепи, величиной ее параметра порядка. Такой подход дает возможность выявить физическую картину упорядочения каждой связи в липидных молекулах разных типов. Проанализированы средние положения центров всех атомов вдоль нормали к поверхности бислоев. Зафиксированы случаи перекрывания положений концевых атомов насыщенных *sn*-1 цепей противоположных монослоев (проникновения концевых атомов цепей одного монослоя в область другого монослоя). Аналогичного перекрывания или сближения атомов ненасыщенных *sn*-2 цепей не установлено ни в одном из 16 исследованных бислоев. Показано, что две углеводородные цепи одной липидной молекулы оказывают взаимное влияние друг на друга, на соответствующие конформационные свойства.

Проведенный анализ данных для изученной совокупности бислоев позволил сделать очередной шаг в прояснение причинно-следственных связей между строением и свойствами липидных молекул.

РАБОТА ВЫПОЛНЕНА ПРИ ПОДДЕРЖКЕ РФФИ (ПРОЕКТ 10-03-00201А), ПРОГРАММЫ ПРЕЗИДЕНТА РФ “ВЕДУЩИЕ НАУЧНЫЕ ШКОЛЫ” НШ-3731.2010.4 И THE SWEDISH INSTITUTE VISBY PROGRAMME 00961/2008, SWEDISH RESEARCH COUNCIL.