

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРАТИРОВАННЫХ БИСЛОЕВ ФОСФОЛИПИДОВ: ВЗАИМНОЕ ВЛИЯНИЕ ОЛИГОМЕРНЫХ ЦЕПЕЙ В ЛИПИДНЫХ МОЛЕКУЛАХ

¹Рабинович А.Л., ²Lyubartsev A.P.

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

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

¹Рабинович А.Л.

²Lyubartsev A.P.

¹Учреждение Российской академии наук Институт биологии Карельского научного центра РАН

²Department of Materials and Environmental Chemistry, Stockholm University

В настоящей работе методом молекулярной динамики (МД) проведено моделирование совокупности гомогенных бислойных систем, образованных липидными молекулами фосфатидилхолинов (ФХ): 1-стеароил-2-олеоил-sn-глицеро-3-ФХ, 1-стеароил-2-линолеоил-sn-глицеро-3-ФХ, 1-стеароил-2-линоленоил-sn-глицеро-3-ФХ, 1-стеароил-2-октадекатетраеноил-sn-глицеро-3-ФХ, 1-стеароил-2-октадекапентаеноил-sn-глицеро-3-ФХ, 1-стеароил-2-арахидоноил-sn-глицеро-3-ФХ, 1-стеароил-2-эйкозапентаеноил-sn-глицеро-3-ФХ, 1-стеароил-2-докозагексаеноил-sn-глицеро-3-ФХ, 1-пальмитоил-2-олеоил-sn-глицеро-3-ФХ, 1-пальмитоил-2-линолеоил-sn-глицеро-3-ФХ, 1-пальмитоил-2-линоленоил-sn-глицеро-3-ФХ, 1-пальмитоил-2-октадекатетраеноил-sn-глицеро-3-ФХ, 1-пальмитоил-2-октадекапентаеноил-sn-глицеро-3-ФХ, 1-пальмитоил-2-арахидоноил-sn-глицеро-3-ФХ, 1-пальмитоил-2-эйкозапентаеноил-sn-глицеро-3-ФХ, 1-пальмитоил-2-докозагексаеноил-sn-глицеро-3-ФХ. Расчетная ячейка каждого бислоя – прямоугольный параллелепипед с периодическими по X, Y и Z граничными условиями. Ячейка содержала 128 молекул ФХ (по 64 на монослой) и 3840 молекул воды (по 30 на молекулу ФХ, что отвечает полному гидратированию липидных молекул). При расчете энергии в МД-ячейке учтены энергия валентных связей и валентных углов, торсионная энергия, энергия неплоских отклонений атомов, примыкающих к двойным связям C=C и C=O, энергия невалентных взаимодействий, электростатическая энергия (в рамках метода суммирования по Эвальду). Общая длина МД-траектории каждого из бислоев составляла 100 нс, начальные 20 нс которых считали участками релаксации.

Рассчитан ряд физических характеристик бислоев, изучено взаимное влияние цепей ацилов друг на друга в липидных молекулах. Рассчитаны функции распределения по углам, которые образуют последовательные атомы углерода, расположенные на обеих цепях, и атомом углерода глицерина, а также функции распределения по расстояниям между упомянутыми парами углеродных атомов цепей ацилов. Показано, что две олигомерные цепи, соединенные в липидной молекуле посредством глицеринового остова, оказывают взаимное влияние на конформационные свойства друг друга; эффект можно описать в терминах упругости вышеуказанных углов и расстояний. Рассчитаны соответствующие коэффициенты упругости в гармоническом приближении. В обоих случаях приведено три варианта аппроксимации: (i) для малых величин отклонения (углов или расстояний) аппроксимировали функцией Гаусса область вблизи максимума каждой расчетной функции распределения; (ii) для средних величин отклонения ширину на половине высоты каждой расчетной функции распределения отождествляли с соответствующей величиной функции Гаусса; (iii) для больших величин отклонения аппроксимировали функцией Гаусса весь диапазон изменения каждой расчетной функции распределения. Каждая молекула фосфолипида может быть охарактеризована профилями коэффициентов упругости, - углов и расстояний между атомами, расположенными на разных олигомерных цепях. Коэффициенты угловых и линейных упругостей существенно зависят от химического строения цепей: профили этих коэффициентов (характер их изменения вдоль по цепи) - столь же отличительные свойства молекул данного строения, как, например, профили параметров порядка связей. Наименьшими значениями упругости и наименьшей амплитудой их изменений вдоль по цепи обладают молекулы, в состав которых входит полиеновая олигомерная цепь.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 10-03-00201а), программы Президента РФ “Ведущие научные школы” НШ-3731.2010.4, Swedish Institute Visby programme 00961/2008, 00675/2009.