

ПОДВИЖНОСТЬ ВОДЫ ВБЛИЗИ ПОВЕРХНОСТИ БЕЛКА

Кадукова М.Н., Зленко Д.В.

Каф. биофизики биологического ф-та МГУ. Россия, 119991, Москва, Воробьёвы горы, 1/24. +7 495 939 4367, dvzlenko@gmail.com

Гидратация белков тесно связана с их функциями. Моделированию гидратации посвящены несколько работ [1, 2], но они неполны, вследствие малой длины траекторий и грубости использованных моделей. Поэтому методами молекулярной динамики мы рассчитали латеральный и тангенциальный коэффициенты диффузии, а также время вращательной корреляции и параметр порядка для дипольного момента воды и вектора нормали к плоскости молекулы вблизи поверхности глобулы куриного лизоцима в 150 мМ растворе NaCl.

Расчеты проведены при помощи пакета программ GROMACS, в силовом поле OPLS-AA. Система состояла из белка, 56029 молекул TIP4P-воды, 156 ионов Na^+ и 164 иона Cl^- . Шаг интегрирования составлял 0.5 фс, для расчета электростатики использовали метод PME, радиусы обрезания составляли 1.25 нм. Был проведен 100 нс расчет, вторая половина которого использовалась для анализа.

Показано, что вблизи поверхности белка подвижность воды снижается на порядок, причем латеральный коэффициент диффузии на расстояниях в 3 – 5 Å от поверхности, существенно превышает тангенциальный. Аналогичные результаты получены для времени вращательной корреляции и параметра порядка, возрастающих вблизи поверхности белка.

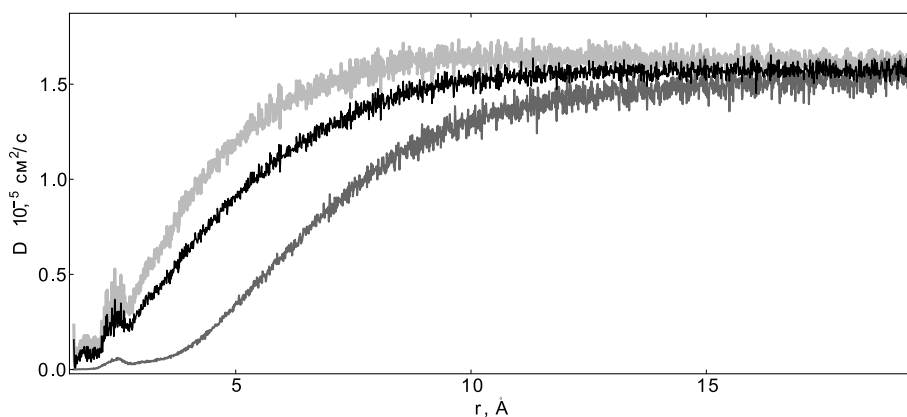


Рис. 1: Коэффициент самодиффузии воды (общий – чёрный, нормальный – тёмно-серый и тангенциальный – светло-серый) над поверхностью куриного лизоцима.

Литература.

1. Makarov C.M. et. al. *Biophys. J.* **75**, 150–158, 1998.
2. Marchi M. et. al. *J. Am. Chem. Soc.* **124**, 6787-6791, 2002.