

ВОСПРОИЗВОДИМОСТЬ СВОЙСТВ ДВУХ-КОМПОНЕНТНЫХ ЛИПИДНЫХ МЕМБРАН В РАЗЛИЧНЫХ СИЛОВЫХ ПОЛЯХ

Пыркова Д.В., Ефремов Р.Г.

Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Россия, 117997, Москва, ул. Миклухо-Макляя, д. 16/10,
тел.: 8 (916) 074-43-65, E-mail: dpyrkova@gmail.com

Цель настоящей работы - проверить воспроизводимость основных молекулярно-динамических параметров липидных мембран в разных силовых полях. Отличительной чертой данной работы является то, что мы рассматриваем свойства двух-компонентных мембран, в то время как большинство подобных работ посвящено простым одно-компонентным системам.

Вычислительные технологии атомистического моделирования биомембран, позволяют существенно дополнить информацию, получаемую в экспериментах. Одним из таких подходов является метод молекулярной динамики (МД), часто применяемый для исследования модельных мембран.

Достоверность и точность расчетов результатов, получаемых из расчетов МД сильно зависят от используемых параметров (силового поля), описывающих межмолекулярные взаимодействия. В настоящее время существует много различных силовых полей для биомолекулярных систем, позволяющих описывать системы с разным уровнем точности: от полно-атомных до крупно-зернистых.

Мы провели расчеты МД для наборов одно- и двух-компонентных мембран, содержащих липиды с одинаковыми полярными головками и разными ацильными цепями: диолеилфосфатидилхолин (18:1) и дипальмитоилфосфатидилхолин (16:0), а также с одинаковыми ацильными цепями и разными полярными головками: диолеилфосфатидилхолин (18:1) и диолеилфосфатидилсерин (18:1) в трех разных силовых полях - одном тяжело-атомном (Gromos43a2x) и двух полно-атомных (Slipids и CHARMM36).

Несмотря на имеющиеся отличия в значениях параметров, ряд важных макроскопических свойств систем сохраняется неизменным, в рассматриваемых силовых полях. Для набора систем с разными полярными головками наблюдаются сходные закономерности изменения латерального распределения свойств во всех используемых силовых полях.

Вместе с тем, значения параметров порядка имеют разные зависимости от концентрации липидов в рассматриваемых силовых полях. Также наблюдаются отличия в распределении межмолекулярных взаимодействий, таких как: водородные связи липид-липид, взаимодействиях липидов с водой и ионами, в зависимости от параметризации силового поля. Полученные результаты подчёркивают необходимость тщательной перепроверки результатов моделирования перед публикацией научных работ о взаимодействиях липид-липид и липид-вода.

Вычисления проводились в суперкомпьютерном центре «Политехнический» СПбУ.