

УДК 539.19+612.822.3

А.А.Малицкий (5 курс, каф. ЭФ), Д.С.Яковлев, к.х.н., с.н.с. (ДАТААРТ),
Б.Ф.Щеголев, к.х.н., с.н.с. (ИФ им. И.П.Павлова РАН)

МОДЕЛИРОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ МЕМБРАНЫ. ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕМБРАНЫ С МЕТАНОЛОМ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Понимание механизма молекулярного транспорта через биологические мембраны позволяет разрабатывать методы борьбы с токсинами, осуществлять направленный поиск высокоэффективных лекарственных препаратов. Вычислительные методики предоставляют возможность моделировать процессы массопереноса на молекулярном уровне и получать информацию, которая не может быть извлечена из результатов экспериментальных исследований.

Целью данной работы являлось изучение взаимодействия молекул метанола(CH_3OH) с модельной мембраной, образованной молекулами $[\text{C}_{22}\text{N}(\text{CH}_3)_3]^+$.

На первом этапе с помощью программы Hyperchem 7.5 [1] была построена молекула $[\text{C}_{22}\text{N}(\text{CH}_3)_3]^+$ и проведена ее полная оптимизация методами MM+ и MNDO. Результаты расчета этой молекулы далее использовались для построения модельной мембраны. Используя программу Gromacs [2], в расчетной ячейке была построена модельная мембрана, состоящая из 242 исходных молекул (фосфолипидный бислой), 4058 молекул воды и 242 ионов хлора (для компенсации заряда), проведена оптимизация структуры мембраны методом молекулярной динамики.

В результате моделирования мембраны на компьютерном “кластере” ФТИ удалось оптимизировать ее структуру, заряды на атомах и энергию, а также давление в ней; получить параметры строения данной мембраны. На следующем этапе работ аналогичным образом была промоделирована полная система, включающая рассчитанную нами мембрану и 50 молекул метанола.

В результате проведенных расчетов методом молекулярной динамики удалось получить количественные характеристики строения модельной мембраны, такие как толщина мембраны ($d \approx 4.28 \text{ нм}$), площадь фосфолипидного слоя ($S_{\text{слоя}} \approx 40.26 \text{ нм}^2$), площадь одной молекулы ($S_{\text{мол}} \approx 0.33 \text{ нм}^2$), а также получить функцию радиального распределения атомов по мембране, координационные числа. Полученные данные хорошо согласуются с экспериментальными данными. Данные расчетов показывают, что добавление молекул метанола к мембране приводит к увеличению расстояния между полярными частями молекул мембраны, и, как следствие, с одной стороны, к увеличению $S_{\text{слоя}}$ (на 1.86 нм^2) и $S_{\text{мол}}$ (на 0.02 нм^2), а с другой стороны – к уменьшению толщины мембраны на 0.22 нм . Добавление молекул метанола приводит к вытеснению части ионов хлора в воду и перераспределению взаимного расстояния между отдельными группами атомов в системе.

ЛИТЕРАТУРА:

1. HyperChem Professional Release 7.5 (demonstration version). A Molecular Visualization and Simulation Software Package. Geinsville, Florida: Hypercube, 2003.
2. David van der Spoel, Erik Lindahl, Berk Hess. Gromacs User Manual version 3.2. 1991–2000: Department of Biophysical Chemistry, University of Groningen. Nijenborgh 4, 9747 AG Groningen, The Netherlands. <http://www.gromacs.org>