

А. Л. Рабинович (Петрозаводск, ИБ КарНЦ РАН). **О влиянии температуры на свойства углеводородных олигомерных цепей в изолированном состоянии и в липидных слоях (компьютерное моделирование).**

Основу природных мембран образуют молекулы фосфолипидов. Среди последних следует особо выделить наличие молекул с ненасыщенными и полиненасыщенными жирнокислотными цепями: они важны для нормального функционирования биомембран [1, 2], для процессов температурной адаптации, — уже давно отмечены факты зависимости степени ненасыщенности липидов различных биомембран от температуры внешней среды [3]. Оценить возможную роль углеводородных цепей различной структуры в этих процессах можно, если сравнить их физические свойства при разных температурах. Однако, экспериментальные данные по свойствам имеются далеко не для всех известных цепей, особенно ненасыщенных. Поэтому для решения задачи разумно использовать теоретические методы. В настоящей работе проанализированы свойства молекул различной структуры. Свойства вычислены по результатам компьютерного моделирования. Использованы: (1) метод Монте–Карло [4, 5] для имитации конформационного поведения углеводородных олигомеров в невозмущенном состоянии (при разработке математической модели учтена специфика внутренних вращений в полиненасыщенных цепях, вынуждающая рассматривать непрерывное изменение торсионных углов молекул) и (2) метод молекулярной динамики [6] для имитации липидных слоев. Расчет многих свойств молекул и их анализ показали, что если строение жирнокислотной цепи таково, что каждая пара соседних двойных связей *сис* разделена лишь одной метиленовой группой, то в невозмущенном состоянии жирнокислотной цепи абсолютные значения температурных коэффициентов параметров порядка *C – H*-связей, примыкающих к двойным связям *C = C*, меньше, чем таковые у *CН₂*-групп. Если количество двойных связей в цепи такого строения достигает максимума, то эта молекула (полиненасыщенная цепь) обладает наименьшими по модулю температурными коэффициентами параметров порядка всех связей, геометрических размеров цепи (расстояния и квадрата расстояния между концевыми атомами углерода, радиуса инерции), а также параметров формы ориентационных функций распределения каждой связи, в сравнении с неразветвленными углеводородными цепями иного строения. Есть все основания полагать, что перечисленные (температурные) свойства невозмущенных изолированных цепей, подобно другим их свойствам, качественно воспроизводятся и в условиях мембраны (в частности, температурный коэффициент размеров полиненасыщенной цепи, входящей в молекулы липидов, в условиях жидкокристаллического монослоя также оказался минимальным). Это позволяет упрочить как традиционные представления, — о роли ненасыщенных цепей в регулировании уровня жидкостности мембран (с поправкой: она осуществляется молекулами, содержащими не более 1–2 *сис*-двойных связей), так и идею о более специфичной роли полиненасыщенных цепей: будучи локализованными в аннулярных слоях интегральных белков, они способствуют стабилизации липид-белковых взаимодействий при колебаниях температуры среды, их оптимизации на каждом малом участке вдоль всей поверхности контакта молекул.

Работа поддержана РФФИ (проект 06-03-32211) и грантом НШ-306.2008.4 Президента РФ для ведущих научных школ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рабинович А. Л., Рипатти П. О. Успехи совр. биологии, 1994, т. 114, с. 581–594.
2. Valentine R. C., Valentine D. L. Prog. Lipid Res., 2004, v. 43, p. 383–402.
3. Крепс Е. М. Липиды клеточных мембран. Л.: Наука, 1981, 339 с.
4. Рабинович А. Л., Рипатти П. О. Журн. физ. химии, 2002, т. 76, с. 1997–2001.
5. Рабинович А. Л. Биофизика, 2008, т. 53, № 3.
6. Рабинович А. Л., Рипатти П. О., Балабаев Н. К. Журн. физ. химии, 2004, т. 78, с. 1160–1165.