

**А. Л. Рабинович, А. П. Любарцев** (Петрозаводск, ИБ КарНЦ РАН, Стокгольм, Стокгольмский университет). **Молекулярно-динамическое моделирование липидных бислоев.**

В последние годы большую актуальность приобрели исследования различных самоорганизующихся систем. Интерес к ним обусловлен не только стремлением расширить и углубить знания о фундаментальных законах природы, но и использовать принцип самоорганизации как таковой. Значительный прогресс отмечен в компьютерном моделировании [1, 2]. Важнейшим направлением работ является изучение биологических мембран и их отдельных компонентов.

Методом молекулярной динамики (МД) при  $T = 303^\circ \text{K}$  проведено моделирование 16 гомогенных бислоев, образованных молекулами фосфатидилхолинов (ФХ) 16:0/18:1(n-9)cis ФХ, 16:0/18:2(n-6)cis ФХ, 16:0/18:3(n-3)cis ФХ, 16:0/18:4(n-3)cis ФХ, 16:0/18:5(n-3)cis ФХ, 16:0/20:4(n-6)cis ФХ, 16:0/20:5(n-3)cis ФХ, 16:0/22:6(n-3)cis ФХ, 18:0/18:1(n-9)cis ФХ, 18:0/18:2(n-6)cis ФХ, 18:0/18:3(n-3)cis ФХ, 18:0/18:4(n-3)cis ФХ, 18:0/18:5(n-3)cis ФХ, 18:0/20:4(n-6)cis ФХ, 18:0/20:5(n-3)cis ФХ, 18:0/22:6(n-3)cis ФХ.

Для каждого из бислоев ФХ была задана расчетная ячейка в виде прямоугольного параллелепипеда 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). Исходными конфигурациями для бислоев ФХ являлись кристаллоподобные структуры. Все атомы системы заданы строго в соответствии с реальным химическим строением молекул, в том числе атомы водорода, и рассматривались как взаимодействующие материальные частицы. Длина МД-траекторий каждого из бислоев составляла 100 нс. Начальные 20 нс считали релаксационными участками, расчет средних характеристик осуществляли по траекториям 80 нс. Запись конфигураций осуществляли с интервалом 1 пс, количество точек усреднения для каждого бислоя было строго равно 80000. 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. Вид потенциальных функций и параметризация отвечали силовому полю CHARMM27, в которое были введены поправки согласно [3]. МД-моделирование осуществлено на основе пакета программ MdynaMix v.5.2 с использованием техники параллельных вычислений на многопроцессорных системах.

По имеющимся МД-траекториям рассчитано большое количество физических характеристик: профили плотности масс разных атомов и групп атомов вдоль нормали  $Z$  к поверхности каждого из бислоев; средние положения всех атомов вдоль нормали; среднеквадратичные пространственные тепловые флуктуации атомов углеводородных цепей разного типа и полярных головных групп молекул липидов; профили параметров порядка всех связей молекул относительно нормали к поверхности; функции распределения векторов-связей по ориентациям относительно этой нормали. Отсчет координат атомов вдоль нормали  $Z$  осуществлен от центра бислоя, в качестве которого выступал центр масс всех молекул ФХ расчетной ячейки. Проведен анализ различий в свойствах разных бислоевых систем.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 10-03-00201а, гранта Президента РФ для ведущих научных школ НШ-3731.2010.4 и Visby programme 00961/2008.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров. / Под ред. В. А. Иванова, А. Л. Рабиновича, А. Р. Хохлова. М.: Книжный дом ЛИБРОКОМ, 2009, 696 с.
2. Lyubartsev A. P., Rabinovich A. L. — Soft Matter., 2011, v. 7, p. 25–39.
3. Högborg C.-J., Nikitin A. M., Lyubartsev A. P. — J. Comput. Chem., 2008, v. 29, p. 2359–2369.