

Д. В. Журкин, А. Л. Рабинович (Петрозаводск, ПетрГУ, ИБ КарНЦ РАН). Изучение свойств липидных молекул методом Монте-Карло.

Значительную роль в исследованиях свойств различных липидных систем, отдельных молекул липидов и их компонентов играют в последние годы методы компьютерного моделирования [1]. В работе, представленной данным докладом, описаны две методики генерирования конформаций ацилов липидных молекул (углеводородных цепей) методом Монте-Карло (МК), в рамках простой выборки и существенной выборки. Обе методики использованы для расчета ряда равновесных характеристик цепей 16:0, 18:0, 18:1(n-9)cis, 18:2(n-6)cis, 18:3(n-3)cis, 18:4(n-3)cis, 18:5(n-3)cis, 20:4(n-6)cis, 20:5(n-3)cis, 22:6(n-3)cis, являющихся распространенными компонентами молекул липидов биомембран. Перечисленные молекулы моделировали в полноатомном приближении. Потенциальную энергию вычисляли как сумму энергий валентных связей, валентных углов, торсионной энергии, энергии невалентных взаимодействий, энергии Юри-Брэдли, электростатической энергии; параметры — поле CHARMM27 с поправками [2].

Простая выборка. При генерировании конформаций молекул методом МК углы внутреннего вращения φ вокруг всех простых связей $C - C$ выбирали равномерно в диапазоне от 0 до 360° (отсчет углов — от заслоненной конформации). При задании величин b всех валентных связей вводили равновероятные случайные отклонения в пределах $\pm 0,02 \text{ \AA}$ от значений, отвечающих равновесным параметрам b_0 поля CHARMM27 [1, 2]. Валентным углам $C - C - C$ и $H - C - H$ в каждой CH_2 -группе задавали равновероятные случайные отклонения до $\pm 2^\circ$ от равновесных; при этом плоскости $C - C - C$ и $H - C - H$ оставались взаимно перпендикулярными, а биссектриса угла $H - C - H$ была продолжением биссектрисы угла $C - C - C$. В каждой CH -группе при двойной связи $C = C$ валентным углам $C - C = C$ и $H - C = C$ (лежащим в одной плоскости) задавали в этой плоскости равновероятные случайные отклонения от равновесных до $\pm 2^\circ$. Для углов φ внутреннего вращения вокруг cis двойных связей $C = C$ вводили случайные отклонения в пределах $\pm 3^\circ$ от значения 0° . Указанные диапазоны изменения структурных параметров коррелируют с теми, которые наблюдаются у молекул липидов в физическом эксперименте (при тех же температурах) и при моделировании методом молекулярной динамики. Конформацию цепи считали самопересекающейся, если энергия невалентных взаимодействий какой-нибудь пары атомов превышала 10 ккал/моль.

Существенная выборка. Генерирование значений валентных углов, длин связей и торсионных углов вокруг cis двойных связей проводили так же, как и в простой выборке. При генерировании торсионных углов φ для всех простых связей $C - C$ использовали существенную выборку. Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots$ — последовательные торсионные углы цепи. Генерирование углов $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ проводили с плотностью вероятности $\sim \exp\{-U(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)/(k_B T)\}$; углов $\varphi_4, \varphi_5, \varphi_6$ — с плотностью вероятности $\sim \exp\{-U(\varphi_4, \varphi_5, \varphi_6)/(k_B T)\}$, углов $\varphi_7, \varphi_8, \varphi_9$ — с плотностью вероятности $\sim \exp\{-U(\varphi_7, \varphi_8, \varphi_9)/(k_B T)\}$ и т. д. Здесь k_B — постоянная Больцмана, T — температура, U — энергия. При переходе между φ_3 и φ_4, φ_6 и φ_7, φ_9 и φ_{10} (и т. д.) учет взаимозависимости внутренних вращений не проводили. Исходя из конкретного химического строения данной молекулярной цепи, выделяли ее фрагменты, содержащие по три последовательных торсионных угла $\varphi_i, \varphi_{i+1}, \varphi_{i+2}$. Для реализации алгоритма разработана специальная программа.

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. *Lyubartsev A. P., Rabinovich A. L.* — *Soft Matter.*, 2011, v. 7, p. 25–39.
2. *Högberg C.-J., Nikitin A. M., Lyubartsev A. P.* — *J. Comput. Chem.*, 2008, v. 29, p. 2359–2369.