

**А. Л. Рабинович, А. П. Любарцев** (Петрозаводск, ИБ КарНЦ РАН; Стокгольм, Стокгольмский университет). **Характеристики упорядочения липидов в бислойных системах: ориентационные функции распределения связей углеводородных цепей. Моделирование методом молекулярной динамики.**

В настоящей работе методом молекулярной динамики (МД) исследованы характеристики упорядочения связей в углеводородных цепях липидов различного строения. Рассмотрены молекулы фосфатидилхолинов, образующие гомогенные гидратированные бислои. Моделирование бислоев проведено при температуре  $T = 303$  К. Каждая липидная молекула содержала две углеводородных цепи: цепь пальмитиновой или стеариновой кислоты (т.е. насыщенную цепь) в положении  $sn-1$ , и цепь олеиновой, линолевой, линоленовой, стеариновой, октадекапентаеновой, арахидоновой, эйкозапентаеновой или докозагексаеновой кислоты (т.е. ненасыщенную цепь, содержащую от 1 до 6 двойных связей *cis*) в положении  $sn-2$ .

Расчетные ячейки бислоев в МД-экспериментах представляли собой прямоугольные параллелепипеды с периодическими по осям  $X$ ,  $Y$  и  $Z$  граничными условиями. В каждой ячейке содержалось по 128 молекул липида данного типа и 3840 молекул воды. Химическое строение липидных молекул воспроизведено строго, атомы водорода учтены явно. Энергия системы рассчитана методом атом-атомных потенциальных функций. Параметры силового поля избраны в соответствии с набором CHARMM27 с поправками, предложенными в работе [1]. Компоненты энергии: энергия валентных связей, энергия валентных углов, торсионная энергия, энергия неплоских отклонений атомов, примыкающих к двойным связям  $C=C$  и  $C=O$ , энергия невалентных взаимодействий, энергия Юри-Брэдли и электростатическая энергия (использован метод суммирования по Эвальду). МД-моделирование осуществлено с помощью пакета программ MdyanaMix v.5.2. Длина МД-траектории каждого из моделируемых бислоев составляла 100 нс, из которых первые 20 нс считали участками релаксации. Запись конфигураций осуществляли с интервалом 1 пс. В итоге моделирования рассчитаны различные физические характеристики бислоев, в том числе функции распределения векторов-связей  $C-C$  и  $C-H$  по ориентациям относительно нормали  $Z$  к поверхности каждого из бислоев. Расчет характеристик осуществляли по траекториям 80 нс, количество точек усреднения для каждого бислоя составило 80000.

Оказалось, что по форме функций распределения связей, т.е. по характеру упорядочения связей в бислоях, можно провести классификацию связей. Все функции распределения удается разделить на группы качественно однотипных функций, и соотнести эти группы (типы) с определенными местоположениями связей в углеводородных цепях разной степени ненасыщенности. Это позволило выявить сходства и различия между разными участками цепей в молекулах липидов согласно физической картине упорядочения связей в мембранных структурах, а также сравнить эти данные с параметрами порядка связей относительно нормали  $Z$ . Обсуждены фундаментальные причины некоторых особых свойств полиненасыщенных цепей липидов в таких

структурах. Полученные результаты способствуют дальнейшему углублению знаний о физических основах функционирования липидных мембран (типичных самоорганизующихся систем) [2, 3].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 10-03-00201а), и программы Президента Российской Федерации — Ведущие научные школы (НШ-1642.2012.4).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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