

ИЗУЧЕНИЕ НАНОМЕХАНИКИ СУПЕРВТОРИЧНЫХ СТРУКТУР МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Минин К.А., Жмуров А.А., Жмурова Н.В.¹

Московский физико-технический институт

¹Рязанский государственный университет им. С.А. Есенина

Одним из наиболее часто встречающихся супервторичных структур являются суперспирали, состоящие из нескольких α -спиралей, закрученных друг относительно друга. Во многих случаях суперспирали могут быть связаны с механической функцией. Например, хвост молекулы миозина представляет собой двойную суперспираль. При сокращении мышцы, энергия поступательного движения головной части молекулы передается через этот суперспиральный участок. Другим примером является молекула фибриногена — основная молекула кровяного сгустка. Фибриноген состоит из трех глобулярных доменов, соединенных между собой двумя тройными суперспиралями. Цитоскелет клетки содержит промежуточные филаменты — ещё один пример суперспиральных белков.

Механические свойства суперспиральных структур часто становились объектом исследований как экспериментальными, так и вычислительными методами. В ходе этих исследований, были обнаружены уникальные механические свойства этих молекулярных систем. При малой нагрузке, ответ на механическое воздействие эластичен. По достижению некоторого критического растяжения, сила реакции молекулы перестает расти и молекула переходит в пластичный режим деформации. После полного растяжения, сила начинает расти нелинейно. На сегодняшний день данное поведение суперспиралей связали с уникальным фазовым переходом от α -спиралей к β -листам.

В данной работе, методами молекулярного моделирования был исследован ряд суперспиральных фрагментов различных белков. Для исследования были выбраны системы, которые обладают различными структурными особенностями, отличаются количеством α -спиралей, имеют параллельную и антипараллельную структуру. Для всех систем была обнаружена похожая зависимость силы от растяжения. Наличие критической силы, при которой система переходит от эластичного режима к пластичному было связано с преобразованием α -спиралей в β -листы. Было показано, что для параллельных суперспиралей критическая сила линейно зависит от количества спиралей, хотя коэффициент наклона этой зависимости больше единицы. Данная закономерность показывает, что в пластичном режиме между α -спиралями в суперспиралях существует кооперативность. Интересно, что критическая сила для антипараллельных суперспиралей несколько ниже. В тоже время, жесткость антипараллельной суперспирали в эластичном режиме несколько выше.