

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СВЯЗАННОЙ ВОДЫ НАД РАЗЛИЧНЫМИ ТИПАМИ ПОВЕРХНОСТЕЙ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Омарова А.Г., Зленко Д.В.

Кафедра биофизики биологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.
Москва, Ленинские горы, 1/24. E-mail: sr.omarova@gmail.com

Вода играет ключевую роль в процессах фолдинга белка, поддержании его нативной структуры и функциональной активности. Взаимодействуя с поверхностью белка посредством дисперсионных сил и образования водородных связей с атомами экспонированных боковых групп, вода образует гидратную оболочку — слой, по различным оценкам достигающий толщины от 8 [1] до 22 Å [2] и со свойствами, отличными от объемной воды. Поскольку белковая поверхность неоднородна по гидрофильности (гидрофобности) и полярности, логично предположить, что поведение молекул воды варьируется вблизи различных ее сайтов.

Для исследования и сравнения свойств гидратной оболочки над гидрофобными, гидрофильными и амфотерными поверхностями, проведено моделирование гидратации графена, апатита и белка лизоцима соответственно. Моделирование выполнено в среде GROMACS. Для систем с графеном и лизоцимом использованы силовое поле OPLS-AA [3] и модель жидкой среды TIP4P, для апатита — поле AMBER99 и модель воды TIP3P. Для каждой системы был осуществлен расчет молекулярной динамики длиной 100 нс.

Для оценки состояния гидратной оболочки на основании данных моделирования рассчитаны коэффициенты самодиффузии и вращательной корреляции. Коэффициент самодиффузии рассчитан по формуле Эйнштейна (1).

$$D = \frac{1}{2N} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\Delta R^2}{\tau}, \quad (1)$$

Коэффициент вращательной корреляции получен как показатель затухания автокорреляционной функции угла вращения молекул.

Анализ полученных данных позволил оценить свойства гидратной оболочки над различными типами поверхностей, степень ассоциации молекул воды в зависимости от свойств окружения.

Литература

1. *M. Nakasako*. Water-protein interactions from high-resolution protein crystallography // *Philos. Trans. R. Soc. Lond. B. Biol. Sci.* 359, 2004.
2. *O. Sushko, R. Dubrovka, R. S. Donnan*. Sub-terahertz spectroscopy reveals that proteins influence the properties of water at greater distances than previously detected // *J. Chem. Phys.* 142, 2015.
3. *W. L. Jorgensen, D. S. Maxwell, J. Tirado-Rives*. Development and Testing of the OPLS All-Atom Force Field on Conformational Energetics and Properties of Organic Liquids // *J. Am. Chem. Soc.* 118, 1996.