

ИЗУЧЕНИЕ НАНОМЕХАНИКИ В-СПИРАЛЬНЫХ СТРУКТУР МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ IN SILICO

Березюк Н.С, Жмуров А.А.¹

МФТИ(ГУ), Россия, 141707, Долгопрудный, Первомайская 28А, 8-916-639-86-46,
berezuk@phystech.edu

¹МФТИ(ГУ), Россия, 141707, Долгопрудный, Первомайская 32к4, 8-926-793-04-60,
zhmurov@gmail.com

Белки участвуют практически в любом процессе, происходящем в клетке, демонстрируя неисчерпаемое разнообразие функций. Каждый белок несет специфическую химическую или структурную функцию, для реализации которой необходимо, чтобы он имел строго определенную трехмерную структуру.

Выделяют четыре уровня структурной организации белков: от первичной до четвертичной. В некоторых случаях, вторичные структуры образуют промежуточный уровень организации – супервторичные структуры. Понимание наномеханики белковых волокон складывается из понимания поведения отдельных их частей под действием внешнего воздействия и кооперативности этих составных частей внутри волокна.

В данной работе исследовались механические свойства различных супервторичных структур с использованием силового поля CHARMM19 в комбинации с моделью неявного растворителя SASA 2002. В вычислительном эксперименте были использованы скорости движения зонда $104 \mu\text{m/s}$. Был произведен сравнительный анализ для структур разной длины, топологии, уровня организации. Были найдены значения модуля Юнга, радиуса гирации, пороговые значения при переходе из одного режима растяжения в другой, относительное удлинение, максимальное растяжение и другие.

Это позволило понять, каким образом механические свойства зависят от структуры конкретных биомолекулярных элементов. В перспективе эти знания могут быть использованы для моделирования уникальных свойств новейших материалов, в основе которых будут лежать биологические молекулы.

Литература.

1. Weigele P. R., Scanlon E., King J. Homotrimeric, β -stranded viral adhesins and tail proteins. - Journal of bacteriology. – 2003. – Т. 185. – №. 14. – С. 4022-4030.
2. Kanamaru S. et al. Structure of the cell-puncturing device of bacteriophage T4. - Nature. – 2002. – Т. 415. – №. 6871. – С. 553-557.
3. Zhmurov A. et al. Mechanical transition from α -helical coiled coils to β -sheets in fibrin (ogen). - Journal of the American Chemical Society. – 2012. – Т. 134. – №. 50. – С. 20396-20402.