

АНАЛИЗ КОНФОРМАЦИЙ МОЛЕКУЛ ЛИПИДОВ ПРИ ПОМОЩИ МЕТОДА ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ

Буслаев П.И., Мустафин Х.С., Гушин И.Ю.

Московский физико-технический институт,
Россия, 141701, г. Долгопрудный, Институтский пер., 9.,
E-mail: ivan.gushchin@phystech.edu

Биологические мембраны являются одной из важнейших компонент живых клеток, выполняя большое количество активных и пассивных функций. При этом, вследствие их амфифильного характера, изучение их экспериментальными методами затруднено. На данный момент для изучения мембран широко используется моделирование методом молекулярной динамики. Моделирование используется для изучения большого количества липидных систем, таких как мицеллы, липидные бислои и везикулы, липидные кубические и гексагональные фазы, как в стационарных, так и в переходных состояниях: в процессе образования пор, слияния и разделения везикул. Также молекулярная динамика позволяет изучать влияние на мембранные системы различных внешних факторов, включая температуру, присутствие низкомолекулярных соединений и мембранных белков.

Несмотря на большое количество исследований липидных систем методами молекулярной динамики, долгое время отсутствовало подробное количественное описание конформаций и динамики структурных изменений отдельных липидных молекул. В данной работе для решения этой задачи нами был использован метод главных компонент [1]. Показано, что метод позволяет выделить основные коллективные движения атомов липидных молекул, оценить характерные амплитуды (до 5 Å) и времена релаксации (до сотен наносекунд) данных движений. На примере различных однокомпонентных липидных систем изучено влияние использования различных силовых полей и температуры при моделировании на структуру липидных молекул [2]. Показано, что крупнозернистое силовое поле Martini хорошо передает основные детали структурных изменений в липидных молекулах при тепловом движении, тогда как повышение температуры ускоряет коллективные движения, но не изменяет их амплитуду. Разработанный метод позволит уточнить используемые для моделирования силовые поля, упростить и ускорить количественные сравнения поведения разнообразных мембранных систем.

Литература

1. Buslaev P., Gordel'iy V., Grudin'ina S., Gushchin I. Principal component analysis of lipid molecule conformational changes in molecular dynamics simulations // *J. Chem. Theory Comput.* том 12, номер 3, год 2016, стр. 1019-1028
2. Buslaev P., Gushchin I. Effects of Coarse Graining and Saturation of Hydrocarbon Chains on Structure and Dynamics of Simulated Lipid Molecules // *Scientific reports* том 7, номер 1, год 2017, стр. 11476