

## ПОДВИЖНОСТЬ МОЛЕКУЛ ЛИПИДА В БИСЛОЙНЫХ МЕМБРАНАХ

Зленко Д.В., Красильников П.М.

119992, г.Москва, Воробьевы горы, Биологический факультет, каф. биофизики, исслед. группа ERG, телефон 939-43-67, E-mail: zoidberg@erg.biophys.msu.ru

Работа посвящена молекулярно-динамическому (МД) моделированию подвижности липидов в бислойных структурах. Исследования проводились на полноатомной модели фрагмента липидной мембраны, состоящей из 48 молекул ДСФХ, в воде. Модель молекулы липида была создана на основе силового поля *opls* [1], для расчетов использовался пакет программ GROMACS [2]. Температура в расчетах поддерживалась равной 300К, нормальное к мембране давление – 1 атм, тангенциальное – 300 атм/нм.

Предложены методы оценки латеральной подвижности липидов в плоскости бислоя. Средняя скорость движения центра масс (ЦМ) молекулы липида меняется в зависимости от того, совершает ли молекула колебания в полости, образованной окружением или перемещается между такими полостями [3]. Анализ динамики изменения средней скорости движения центра масс отдельной молекулы липида позволил оценить время оседлой жизни как 550 – 600 пс.

Для описания движения ЦМ молекул липида на временах 0.1 – 100 пс была использована модель двумерных случайных блужданий. Численный эксперимент позволил построить зависимость отношения среднего квадрата смещения ЦМ липида к времени за которое смещение произошло, от этого времени. На больших временах (>1мкс) этот параметр является коэффициентом диффузии (КД). Применение для описания этой зависимости модели, предполагающей равновероятность всех направлений очередного диффузионного смещения, дало не очень хорошее совпадение с данными численного эксперимента. Введение же в модель предположения о неравновероятности всех направлений очередного диффузионного смещения и связи между его направлением и направлением предыдущего смещения позволило существенно улучшить предсказания модели случайных блужданий.

Использование модели случайных блужданий позволило оценить характерные времена периодических тепловых колебаний (0.1 пс) и нерегулярных тепловых движений (1 пс), а также их амплитуды для ЦМ молекул (8.5 и 4.5 пм, соответственно). Полученные результаты свидетельствуют о том, что периодические тепловые колебания не могут быть полностью отделены от случайных диффузионных движений, а каждое элементарное молекулярное смещение одновременно имеет и колебательные и диффузионные свойства, что вносит уточнения в теория жидкости [3]. Это подтверждается тем, в пределе исследованный параметр дает значение  $2.8 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2/\text{сек}$ , очень хорошо совпадает с экспериментальным КД липидов в бислойных мембранах.

### Литература.

1. Jorgensen W.L., Maxwell D.S., Tirado-Rives J. // J. Chem. Soc. 1996. 118:11225-11236.
2. Lindahl E., Hess B., van der Spoel D. // J. Mol. Mod. 2001. 7:306-317.
3. Френкель Я.И. “Кинетическая теория жидкостей”. Изд-во Академии наук СССР, Москва, 1945.