

ДИФФУЗИЯ МОЛЕКУЛ ЛИПИДА НА ПИКОСЕКУНДНЫХ ВРЕМЕНАХ

Зленко Д.В.

Россия, Москва, МГУ имени М.В. Ломоносова,
Биологический факультет, каф. Биофизики, dvzlenko@gmail.com

1. Введение. Функциональная активность небелковой составляющей клеточных липидных мембран в значительной степени определяется их вязкостью, а также подвижностью молекул липида. Эти параметры в основном определяют кинетики взаимодействия мембранных белков, а значит и скорости протекания мембранных процессов. Именно в этом и заключается важность исследования вязкостных свойств липидных мембран.

Достаточно очевидно, что такой важный для физиологии макроскопический параметр белков и липидов, как например, коэффициент диффузии тесно связан с параметрами тепловых колебаний молекул, однако, о деталях молекулярных процессов, приводящих в конечном счете к макроскопическому коэффициенту диффузии известно мало.

2. Методы. Для молекулярно-динамических расчетов использовали пакет программ GROMACS, с силовым полем OPLS. Использовался интегратор sd, шаг интегрирования составлял 0.25 фемтосекунды. Константа термостатирования составляла 0.1 пс, для расчета электростатических взаимодействий использовался метод PME.

Молекулярная модель липидной мембраны в жидкокристаллическом состоянии была сформирована из 48 молекул дистеароилфосфатидилхолина (ДСФХ), уложенных в плотнейшем гексагональном порядке. Модельный бислой окружен 1759 молекулами воды. После проведения релаксационного расчета параметры молекулярной модели пришли в соответствие с параметрами реального ДСФХ бислоя: плотность воды и мембраны, средняя площадь на молекулу липида и толщина мембраны, а также коэффициенты диффузии молекул липида и воды и время вращательной корреляции липида пришли в соответствие с экспериментальными данными.

3. Результаты. Коэффициент диффузии (D) был представлен как отношение среднего квадрата смещения к времени за которое это смещение произошло. Затем была построена зависимость этого параметра от времени (рис.1). Для того чтобы описать немонокотное изменение D вся временная шкала была разбита на три интервала. На самых малых временах можно считать, что центр масс (ЦМ) молекулы липида движется линейно. На временах порядка периода тепловых колебаний ЦМ можно рассматривать движение молекулы как колебательное. Наконец, на временах существенно превышающих период тепловых колебаний становятся заметными диффузионные смещения молекулы как целого. Для того чтобы полученная зависимость хорошо описывала данные МД нам пришлось вести в модель предположение о неравновероятности направлений для очередного диффузионного движения. Простая экстраполяция модельной кривой на бесконечные времена дает результат $2.86 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2/\text{сек}$, что очень близко к экспериментальному значению. Остальные параметры молекулярных движений также приобрели разумные значения. Это означает, что между диффузией как таковой и микроскопическими тепловыми движениями с характерными временами порядка пикосекунд существует тесная связь, более того, на основании данных о тепловых движениях можно оценить макроскопический коэффициент диффузии.

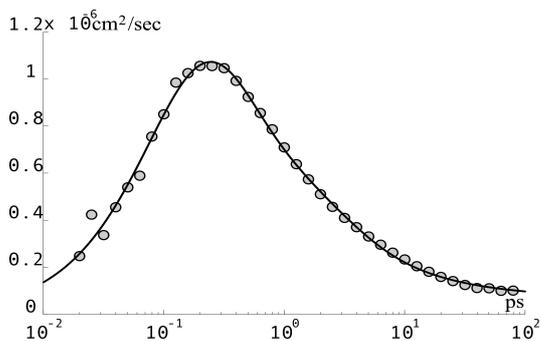


Рис. 1. Коэффициент диффузии как функция времени расчета. Кружки - данные МД, сплошная линия - результат фитирования данных МД предложенной моделью.