

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОФОБНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

Лукашенко А.Т., Князева О.С., Коваленко¹ И.Б., Абатурова¹ А.М., Грачев Е.А.

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова,
Физический ф-т, кафедра Компьютерных методов физики.
Россия, 119992, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2,
Тел. (095)9394178, e-mail: a_lu@mail.ru

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
Биологический ф-т, каф. Биофизики,
Россия, 119992, Москва, Ленинские горы, МГУ

В биологических системах гидрофобные взаимодействия оказывают управляющее воздействие на такие процессы, как поведение малых неполярных молекул, формирование белковой глобулы, докинг белков, обеспечение стабильности мембран и т.д. В воде существует неупорядоченная сеть водородных связей между её молекулами. Внедрение гидрофобных частиц или их групп приводит к реорганизации этой сети. Энтропийный эффект внедрения малых гидрофобных частиц (размером до ~1 нм) ведёт к эффективному выталкиванию их из воды и взаимному притяжению. В случае внедрения в воду более протяжённых гидрофобных частиц или совокупностей нескольких малых вблизи них формируется поверхность, напоминающая поверхность раздела жидкость-газ. Уменьшение плотности воды по сравнению с объёмной становится причиной появления сильного притяжения между гидрофобными объектами.

На основе уравнений Хаммера, Пратта и др. [1] нами была разработана методика расчёта энергии сольватации малых гидрофобных частиц и вычисления потенциала их взаимодействия. С помощью данной методики были проведены расчеты энергии сольватации для молекул метана и аргона. Также нами была разработана методика расчёта плотности воды вблизи малых гидрофобных частиц.

Для макромолекул (например, молекул белков) разработанные методы не могут быть применены, поэтому нами разработана модель для учёта влияния гидрофобных сил на взаимодействие белков в водном растворе на основе результатов экспериментальных измерений силы притяжения между плоскими поверхностями [2] и разработанного Б.В. Дерягиным [3] метода перехода к искривлённым поверхностям.

Литература.

1. G. Hummer, S. Garde, A.E. Garcia, M.E. Paulaitis and L.R. Pratt, "Hydrophobic Effects on a Molecular Scale".
2. В.И. Ролдугин, "Физикохимия поверхности", Долгопрудный: Издательский Дом "Интеллект", 2008.
3. Б.В. Дерягин, Н.В. Чураев, В.М. Муллер, "Поверхностные силы", М.: Наука, 1985.