

ДИФфуЗИОННАЯ И ТЕПЛОВАЯ ПОДВИЖНОСТЬ МОЛЕКУЛ ЛИПИДА В БИСЛОЙНЫХ МЕМБРАНАХ

Зленко Д.В., Красильников П.М.

Москва, Ленинские горы, МГУ, биологический факультет. zoidberg@erg.biophys.msu.ru

Традиционно коэффициенты диффузии (КД) рассчитывают на основании исследования подвижности молекул на протяжении макроскопических отрезков времени. В самом деле, чем длиннее этот отрезок времени, тем больше и достовернее будет смещение молекулы и точнее определен КД. Очевидно, что КД должен быть связан с параметрами тепловых движений. Экспериментально исследовать подвижность индивидуальных молекул липида практически невозможно, но эти данные можно получить из расчетов молекулярной динамики (МД). Именно расчету КД на основании параметров тепловых движений, полученных из МД, и посвящена настоящая работа.

В работе использована полноатомная (opls) модель фрагмента ДСФХ мембраны (48 ДСФХ/1759 молекул воды). Расчеты проводились при помощи пакета GROMACS, с шагом интегрирования 0.25 фс и радиусами обрезания 1.5 нм. Траектории имели длину не более 100 пс. Параметры модельной мембраны, как геометрические, так и динамические находятся в полном соответствии с экспериментальными данными.

Мы рассмотрели “эффективный коэффициент диффузии” (ЭКД) – отношение квадрата смещения центра масс (ЦМ) молекул к времени за которое это смещение произошло. На малых временах этот параметр немонотонно зависит от времени. На временах меньше периода тепловых движений можно считать, что ЦМ линейно движется от одной стенки потенциальной ямы к другой. На временах порядка периода тепловых колебаний, если считать тепловые колебания гармоническими, также легко получить выражение для вклада в ЭКД. При дальнейшем увеличении времени станут заметными диффузионные смещения равновесной точки тепловых колебаний. Зависимость ЭКД от времени для этого временного интервала можно получить решив задачу о двумерных случайных блужданиях. Для описания ЭКД во всем диапазоне времен мы сложили полученные вклады, умножив их на соответствующие экспоненты, тем самым обеспечив искусственное затухание или появление того или иного режима при изменении масштаба времени. Фитирование данных МД построенной моделью показало некоторое несоответствие в области 1-10 пс, которое полностью исчезло после введения предположения о неравновероятности всех направлений диффузионных движений относительно направления предыдущего движения. В результате модельная кривая совпала с данными МД ($RMSD \sim 0.01$), предел к которому стремиться модель на больших временах совпадает с реальным КД для ДСФХ ($2.86 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2/\text{сек}$).

Показано, что КД строго связан с параметрами тепловых движений с малыми характерными временами (< 100 пс). Кроме того, показано, что невозможно разделить чисто диффузионные и чисто колебательные движения липидов, диффузионные движения в значительной степени обладают чертами колебательных.