

Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН
Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

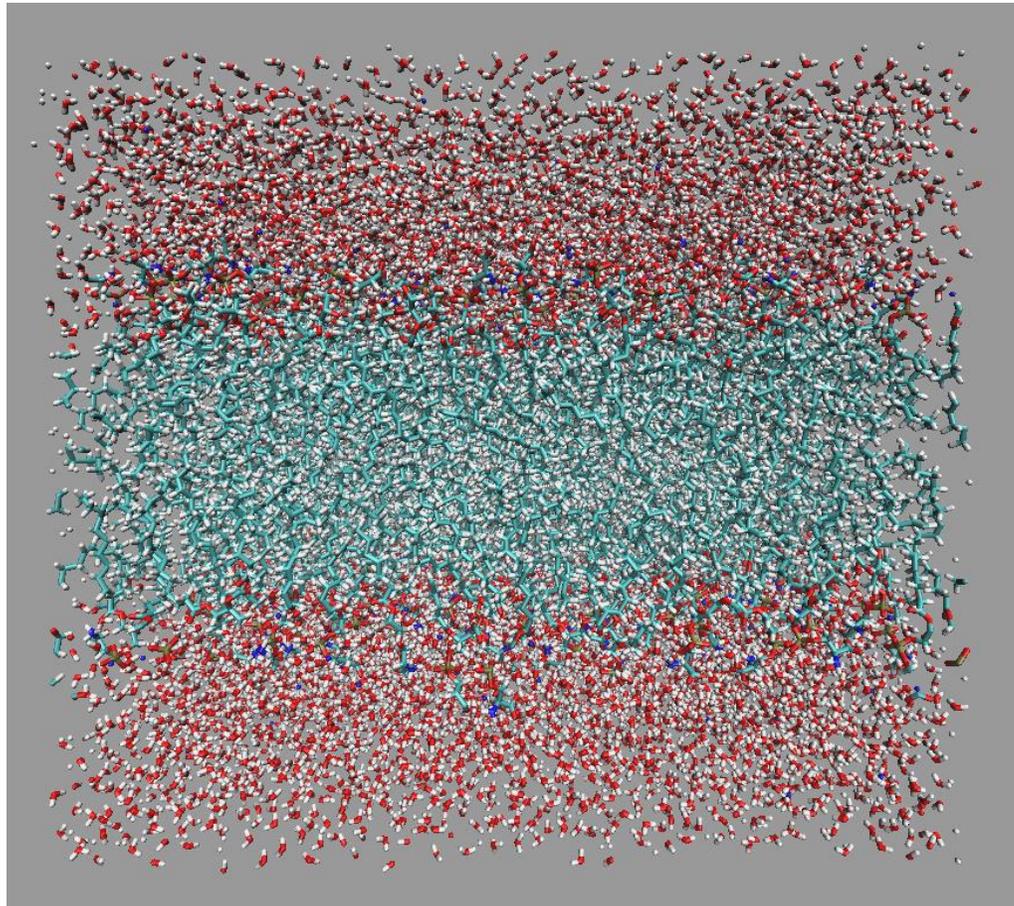
**Программа для анализа структурно-динамических
характеристик водородных связей в модельных
биомембранах**

Наталья В. Коробова

Содержание

1. Биологическая мембрана. Компьютерный эксперимент;
2. Программа, предназначенная для анализа водородных связей:
 - a) Методы;
 - b) Структура программы;
3. Картирование липидных бислоёв
4. Заключение

Биологическая мембрана. Компьютерный эксперимент



Гидратированный липидный модельный бислой ДОФС. Голубым цветом изображены молекулы липида, красным – молекулы воды, синим – ионы натрия.

Параметры системы:

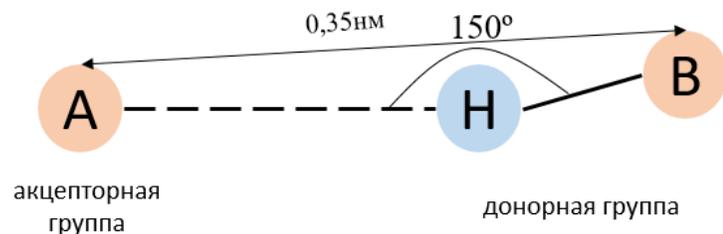
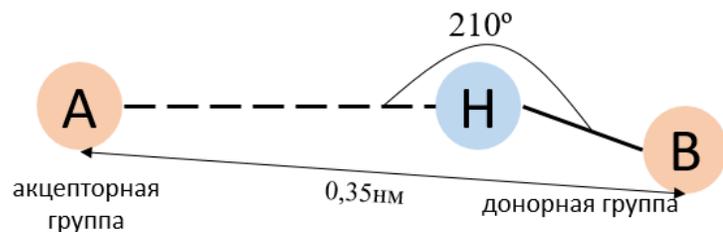
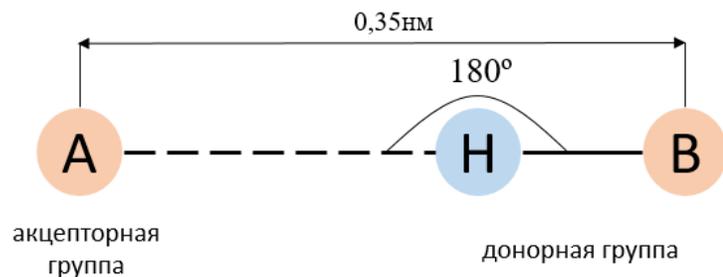
Число молекул ДОФС – 288

Число молекул воды - 14871

Число молекул ионов натрия - 288

D. V. Pyrkova *et al.* (2013) *J. BIOMOL. STRUCT. DYN.*,
vol. 31, no. 1, pp. 87–95,

Программа, предназначенная для анализа водородных связей. Методы

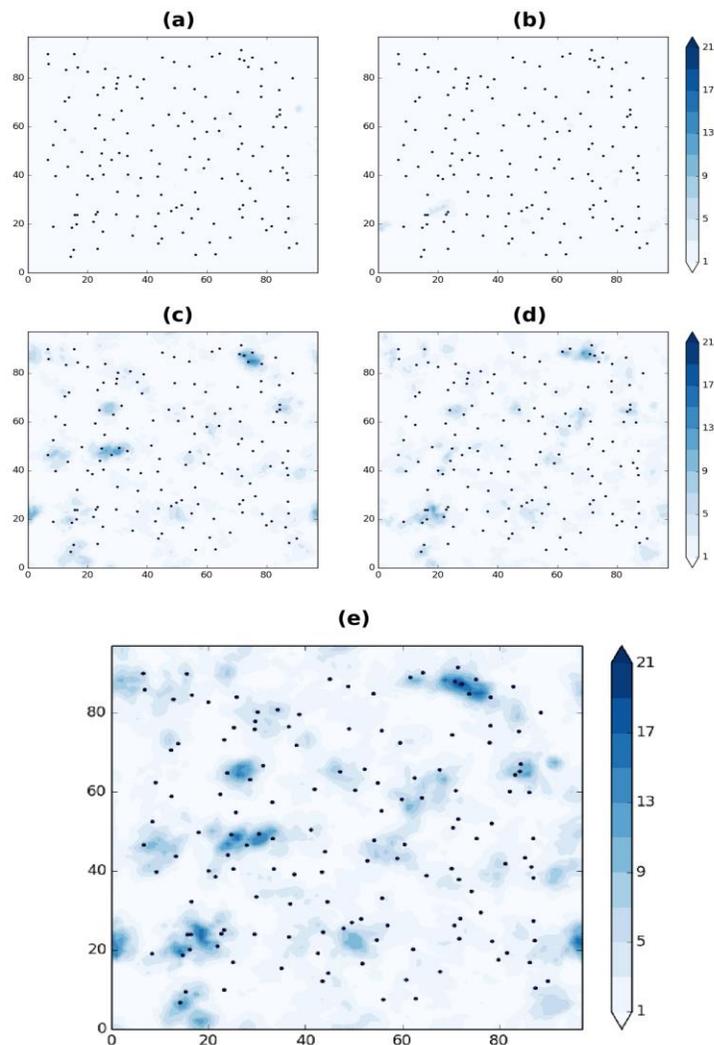


Структурное представление водородной связи и численные параметры, используемые в программном обеспечении в качестве критериев выявления водородной связи.

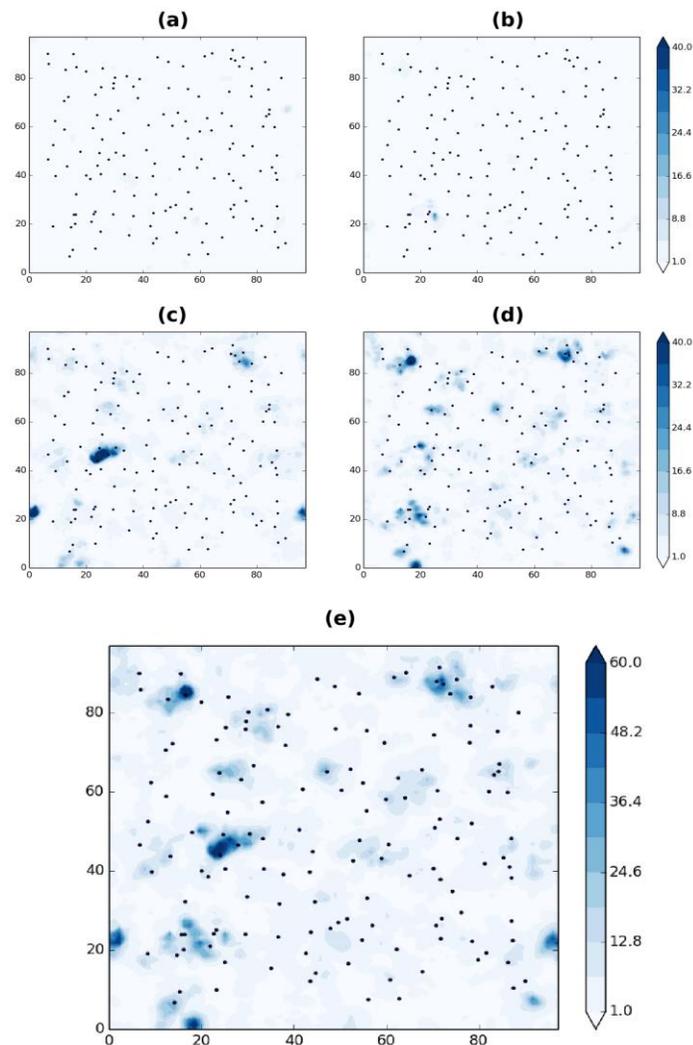
Время жизни связи равно суммарному числу фреймов, в которых она наблюдается.

Картирование липидных бислоёв

Карта распределения межлипидных водородных связей в монослое системы ДОФС



Карта распределения времени жизни межлипидных водородных связей в монослое системы ДОФС



- (a) Водородные связи, образованные группой $C = O_1$;
- (b) Водородные связи, образованные группой $C = O_2$;
- (c) Водородные связи, образованные группой COO^- ;
- (d) Водородные связи, образованные группой PO_4^- ;
- (e) Водородные связи во всей системе

Заключение

- Создана программа, предназначенная для численного анализа водородных связей в модельных липидных бислоях;
- Визуализированы распределения плотности водородных связей и среднего времени существования водородных связей;
- Показано, что группы PO_4^- и COO^- вносят существенный вклад в образовании водородной связи в липидном монослое ДОФС

Благодарности

- Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 14-14-00871) и Российского фонда фундаментальных исследований (грант 16-04-00578). Расчеты проводили с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра «Политехнический» в СПбГТУ.

Спасибо за внимание!