

Влияние вязкости среды на формирование пространственной структуры полипептидов

Эрендженова А.А., Армеев Г.А., Шайтан К.В.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, 119234, Москва, Ленинские горы, 1/12

e-mail: erend_anastasia@mail.ru

DOI: 10.37795/RCEM.2020.93.86.030

Молекулярная динамика формирования уникальной пространственной структуры биополимеров [1] является ключом к пониманию общих закономерностей формирования 3D-структур биологически активных макромолекул и, в перспективе, может стать одним из эффективных методов структурной биологии. В работе методами молекулярной динамики при различных значениях параметров виртуальной среды был изучен фолдинг модельных полипептидных последовательностей, состоящих из 50 и 150 аминокислотных остатков с чередованием аланина и глицина. Стартовые конформации соответствовали полностью развернутой структуре цепи. Изменение диссипативных свойств среды моделировалось за счет вариации параметров ланжевеновского термостата. Длина траекторий фолдинга составляла 2 нс для 50 остатков, 2 и 4 нс для цепи из 150 остатков. Показано, что сворачивание рассмотренных полипептидных последовательностей при эффективной вязкости среды порядка вязкости воды происходит преимущественно в альфа-спиральные конформации. Уменьшение вязкости среды ниже некоторого порога приводит к сворачиванию в случайную конформацию (рис.1).

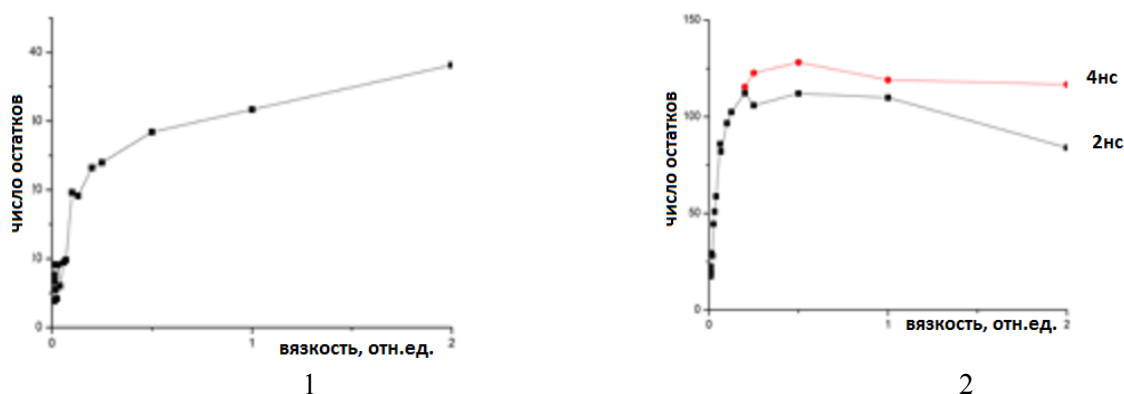


Рис.1. Зависимость числа аминокислотных остатков в альфа-спиральной конформации от вязкости среды в относительных единицах (вязкость воды порядка 1). 1 - (AlaGly)₅₀; 2 - (AlaGly)₁₅₀. Эффект вязкости резко проявляется для более длинной цепи. Увеличение длины траектории до 4 нс существенно при больших вязкостях ввиду общего торможения процесса фолдинга (2). Каждая точка на графиках – результат усреднения по 20 траекториям.