

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ РАЗЛИЧИЯ СИММЕТРИИ ГИДРАТАЦИИ ФИБРИЛЛЯРНЫХ БИОПОЛИМЕРОВ И ОБЪЕМНОЙ ВОДЫ КАК ПРИЧИНА НЕОДНОРОДНОСТЕЙ В РАСПРЕДЕЛЕНИИ ПЛОТНОСТИ В РАСТВОРАХ МАКРОМОЛЕКУЛ

Н.Г.Есипова, И.В.Филатов, М.А.Рубин, В.Г.Туманян, В.А.Намиот¹

Учреждение Российской академии наук Институт молекулярной биологии
им. В.А.Энгельгардта РАН, 119991 Москва, ул. Вавилова 32, Россия,

¹Институт ядерной физики Московского государственного университета
им. М.В.Ломоносова, 119992, Москва, Воробьевы горы, Россия, E-MAIL: nge@imb.imb.ac.ru

Проблема гидратации биополимеров – это проблема появления слоя адсорбируемой воды на поверхности макромолекул, основные физические свойства которой сильно отличаются от свойств объемной воды. Именно по изменившимся физическим свойствам сформировались те признаки, которые служат основаниями для разделения воды на гидратную сферу макромолекулы и объемную воду, т.е. на определение понятия гидратации. К наиболее проработанным по данным литературы признакам относятся: температуры замерзания свободной и связанной воды, величины их диэлектрической проницаемости, их параметры релаксации, определенные методом ЯМР, их калориметрические характеристики, времена и параметры диффузии и некоторые другие. В данной работе мы провели анализ гидратации фибриллярных олигопептидов в трех главных регулярных конформациях и олигопептидов, изоморфных коллагену – коллагену, фибриллярному трехцепному белку, для которого гидратная вода является элементом структуры макромолекулы в связи с экспонированностью его незавязанных в межпептидные водородные связи карбоксильных групп на воду. Анализ гидратации проводили с использованием метода Монте Карло. Вводились спиральные периодические граничные условия и геометрический критерий водородной связи. Вычислялись частоты встречаемости водных мостиков и молекул воды, вовлеченных в водородные связи в ансамбле, а также средние координаты и энергии взаимодействия с водой и с полипептидом, вовлеченных в мостик молекул и их дисперсии. Использовался геометрический критерий водородной связи (Дьяконова, Маленков). Рассчитана гидратация (энергия гидратации структур на асимметричную единицу и мостиков воды в одноцепочечных спиральных полипептидах для: антипараллельной и параллельной β -структур, ϵ -спирали, левой спиралитипа полипролин 2 (PP2), α -спирали и спиралитипа 3/10. Был проведен также расчет гидратации трехцепочечных спиральных полипептидов коллагенового типа для шести вариантов структуры коллагена. Показано, что симметрия гидратной оболочки макромолекулы отличается от симметрии спиралей, наблюдающихся в объемной воде, причем взаимодействие вода-вода не зависит ни от последовательности аминокислот, ни от конформации макромолекулы. Это определяет появление областей пониженной плотности расположения молекул воды в пограничных областях между гидратными слоями и объемной водой. Обсуждаются возможности возникновения областей неравномерной концентрации растворенных в воде веществ.

DIFFERENCES IN HYDRATIONAL SYMMETRY OF FIBRILLAR BIOPOLYMERS AND BULK WATER AS A CAUSE OF INHOMOGENEOUS DENSITY DISTRIBUTION IN MACROMOLECULES SOLUTIONS

N.G.Esipova, I.V.Filatov, M.A.Rubin, V.G.Tumanyan, V.A.Namiot¹

Engelhardt Institute of Molecular Biology, Russian Academy of Sciences, ul. Vavilova 32, Moscow, 119991
Russia

¹Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University, Vorob'evy Gory, Moscow, 119992
Russia, E-MAIL: nge@imb.imb.ac.ru

The problem of inhomogeneous in water disposition around biopolymers is discussed.

Литература

1. Eisenmenger F., Eisenhaber F., Tumanyan V.G., Esipova N.G. Monte Carlo simulation of the water environment of collagen // *Studia biophysica*. 1983. 98. 3. 155-160.