

Модульная структура гидратных оболочек биополимеров

В.И. Денисов

¹Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
d_eviat@mail.ru

Гидратация биомолекул критически важна для взаимного распознавания реагентов в ферментативных реакциях [1]. До сих пор распространено мнение, что какие-либо закономерности пространственной структуры гидратных оболочек отсутствуют, однако кристаллографические аргументы указывают на необходимость пересмотра традиционной точки зрения. Известная гибкость молекул H₂O допускает их соединение, сохраняя тетраэдрическую координацию, в кластеры (модули) размером порядка 1 нм, обладающие свойством фрактальности [2, 3]. Из таких модулей могут быть созданы водные «каркасы», комплементарные (соединенные общими водородными связями) ДНК, РНК, белку коллагену и др. биомолекулам, пространственная конфигурация которых была определена ранее методами рентгеноструктурного анализа или ядерного магнитного резонанса. Все же доказательство существования параметров стыковки молекул при таком преобразовании недостаточно убедительно. Нами проведен расчет указанных параметров двумя независимыми способами. Ссылка на один из них – через изменение межмолекулярных расстояний при повороте связей во второй координационной сфере в полиэдре Лавеса - дана в работе [2]. Другой способ основан на построении гексациклов с различными значениями торсионного угла. Показано, что минимальный модуль из 6 молекул («твист-ванна») может образоваться только при различных значениях торсионных углов между соседними парами (37 ± 4 градуса). В модуле из 10 молекул отличия еще больше (19 и 53 градуса). На этой основе построены (в пакете HyperChem) гидратные оболочки для алюмосиликатов, моносахаридов, флавоноидов [4].

Данная концепция имеет важные применения. До сих пор в биохимии не существует подходов, разработка которых помогала бы заранее определять, может ли та или иная пара молекул вступать в реакцию друг с другом. Впервые показано, что проблему можно разрешить, если использовать принцип первоначального реагирования гидратных оболочек с учетом их закономерной структурированности. Продемонстрировано, что типичной биохимической реакции гетерополимеризации предшествует сближение молекул и образование комплекса из принадлежащих им гидратных оболочек, за которым следует дальнейшее стягивание ориентированных реагентов с удалением лишних молекул H₂O, заканчивающееся непосредственным взаимодействием биоструктур с образованием химической связи и одновременным формированием новой гидратной оболочки.

ЛИТЕРАТУРА

1. S.K. Pal, A.H. Zewail. Dynamics of water in biological recognition. Chem. Rev., 104, 2099-2123 (2004).
2. Н.А. Бульенков. О возможной роли гидратации как ведущего интеграционного фактора в организации биосистем на различных уровнях их иерархии. Биофизика, 36, 181-242 (1991).
3. В.И.Лобышев, А.Б. Соловей, Н.А. Бульенков. Компьютерный модульный дизайн параметрических структур воды. Биофизика, 48, 1011-1021 (2003).
4. V.I. Denisov, S.D. Zakharov. Structural order in hydration shells of biopolymers: self-organization of water- carbohydrate complexes. Abstract book, III International Conference “Crystal materials 2010”, Kharkov, Ukraine, May 31-June 3, 2010, p. 94.