

Однодневный научный семинар «Коллективные движения в жидкостях и биологических системах»

Программа семинара:

· **Докладчик:** Николай Кондратюк

Тема доклада: «Самосогласованный молекулярно-динамический расчет коэффициента диффузии n-триаконтана»

Аннотация: Расчет транспортных свойств веществ является одним из важнейших применений методов кинетической теории. Использование современных вычислительных возможностей молекулярного моделирования позволяет распространить результаты кинетической теории на такие системы, как высшие алканы. Подобные углеводородные жидкости характеризуются, с одной стороны, характерной цепочечной молекулярной структурой, а с другой стороны, сложным межатомным взаимодействием.

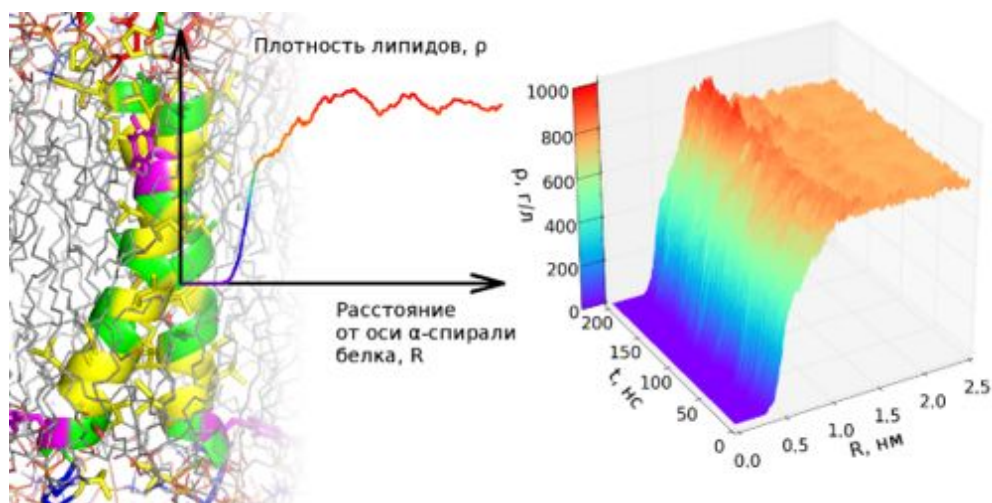
В данной работе на примере моделей n-триаконтана исследованы аномальные характеристики диффузии, проявляющиеся при использовании соотношения Эйнштейна-Смолуховского, и особенности асимптотического поведения автокоррелятора скоростей, используемого для расчета коэффициента диффузии по формуле Грина-Кубо. Достигнуто согласие данных подходов для рассматриваемой жидкости. Проведено сравнение различных моделей по воспроизведению уравнения состояния и температурной зависимости коэффициента диффузии.

· **Докладчик:** Андрей Кузнецов

Тема доклада: «Оценка роли липидного окружения в димеризации трансмембранных доменов гликофорина А с помощью компьютерного моделирования»

Аннотация: Трансмембранные (ТМ) α -спиральные домены имеются у большинства мембранных белков и являются функционально важными. Их взаимодействие определяет работу ионных каналов и рецепторов клетки. С нарушением белок-белковых взаимодействий вследствие мутаций связано развитие рака, диабета, нейродегенеративных заболеваний. В случае рецепторных тирозинкиназ (РТК) ТМ-домен представлен одной α -спиралью, а активной формой рецептора является димер. Известно, что свойства липидного окружения могут влиять на димеризацию ТМ-доменов РТК и других белков, однако детально этот процесс не изучен. ТМ-домены гликофорина А являются удобным модельным объектом для исследования поведения α -спиралей в мембране. В настоящей работе с помощью метода молекулярной динамики в явно заданном гидратированном липидном бислое провели

сравнение параметров димеров гликофорина А, его мутантных форм и искусственных полипептидов. Показали, что одиночные ТМ-пептиды вызывают формирование в мембране неоднородностей пространственного распределения плотности липидов, особенно в гидрофобной области бислоя. В случае мономера ТМ-домена гликофорина А распределение этих свойств несимметрично: липиды иммобилизованы вблизи интерфейса димеризации — а при димеризации, напротив, проявляется симметрия. Предполагается, что ТМ-пептиды могут взаимодействовать через липидное окружение на больших расстояниях, когда прямой контакт аминокислотных остатков невозможен. Путём сравнения двух мутантных форм гликофорина А продемонстрировали, что точечные мутации в ТМ-доменах могут оказывать эффект на белок-белковые контакты или на взаимодействие с липидами.



· **Докладчик:** Максим Орехов

Тема доклада: «Пространственные и временные свойства сольватации иона и её влияние на диффузию иона в жидкости»

Аннотация: Методом молекулярной динамики исследована связь сольватации и диффузии ионов. Обнаружено наличие множественных максимумов на зависимости коэффициента диффузии иона от радиуса иона. Возникновение этих максимумов связано со свойствами сольватных оболочек. Построена теоретическая модель, описывающая этот эффект.

