

Моделирование процесса переноса протона в канале грамицидина А методом КМ/ММ молекулярной динамики

Калиман Илья Александрович

студент

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, химический

факультет, Москва, Россия

E-mail: ikaliman@mail.ru

Перенос протона, является одной из самых значимых химических реакций в живых организмах. Аномально высокая скорость переноса протона по сравнению с другими катионами привела к многочисленным спорам относительно существования различных механизмов переноса протона и других катионов. Наличие цепи из молекул воды, соединённых водородными связями, делает осуществимым такой механизм переноса протона, когда тот «прыгает» с одной молекулы воды на другую, перемещаясь по цепи. В то же время другие катионы не могут воспользоваться такой возможностью, и их перенос осуществляется посредством простой диффузии.

Исследуемый трансмембранный ионный канал представляет собой димер пентадекапептида грамицидина А, состоящего из L- и D-аминокислот, образующих правую β -спиральную структуру. Основной функцией этого канала в природе является транспорт однозарядных катионов, однако скорость переноса протона по нему более чем на порядок выше по сравнению с другими ионами, что и обуславливает повышенный интерес к этой системе. Такое различие в скоростях переноса можно объяснить наличием хорошо структурированной единой цепи из молекул воды в рассматриваемом канале грамицидина А.

Для теоретического описания данной системы наилучшим является использование нового гибридного квантово/молекулярно механического подхода. Он заключается в использовании квантовой механики для описания только самой важной части системы (в данном случае цепи из молекул воды), а для описания окружения (канал грамицидина А) используются методы молекулярной механики, основанные на использовании эмпирических потенциалов. Такой подход позволяет исследовать большие системы, по сравнению с чистыми неэмпирическими методами *ab initio*, при использовании таких же вычислительных ресурсов. Таким образом, использование методов КМ/ММ в сочетании с методами молекулярной динамики позволяет следить за эволюцией системы во времени и непосредственно наблюдать за протеканием химических реакций даже в сравнительно больших системах.

В рамках данной работы разработана оригинальная программа, впервые реализующая молекулярную динамику в рамках гибридного квантово/молекулярно механического подхода, а также проведено исследование двух возможных механизмов переноса протона в канале грамицидина А: непосредственный перенос протона и механизм, заключающийся в переносе отрицательно заряженного ионного дефекта.

В ходе проведённого моделирования продемонстрирована возможность реализации обоих механизмов переноса протона. Кроме того, сделан предварительный вывод о предпочтительности механизма непосредственного переноса протона по сравнению с переносом отрицательно заряженного ионного дефекта.