

ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ  
КАФЕДРА ОБЩЕЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Иванова Анастасия Владимировна,  
Бескачко Валерий Петрович

Механические свойства  
индивидуальных липидов,  
выявляемые  
квантовохимическими  
методами

Пушино, 2011

# Полноатомное описание системы

**Плюс:** подробное описание системы

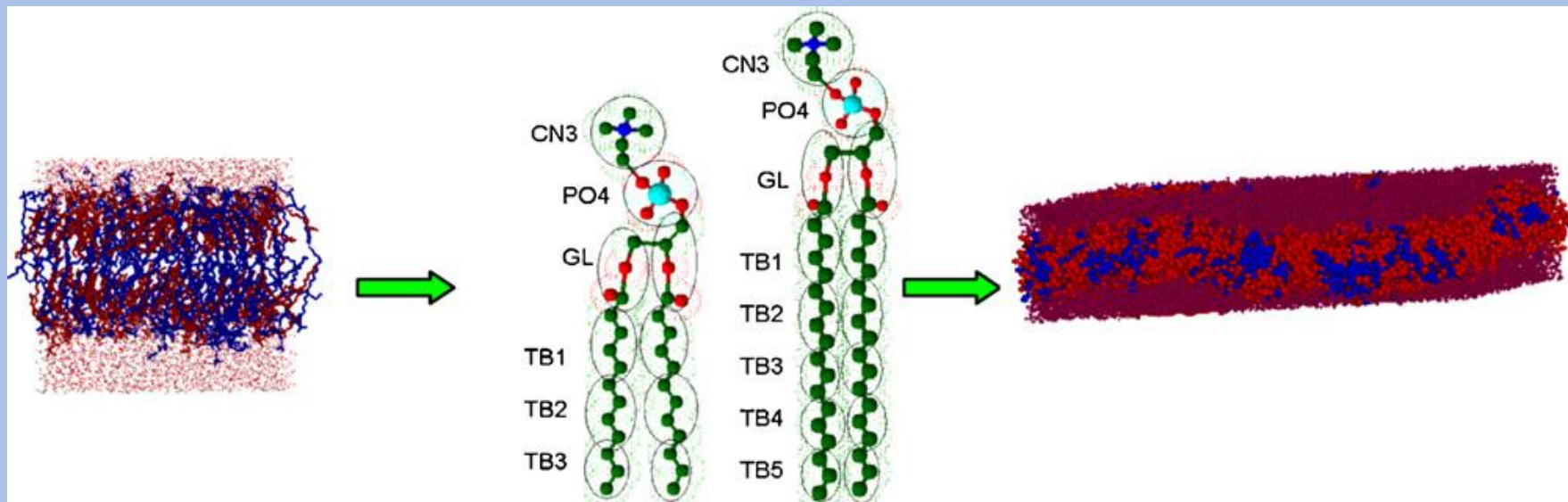
**Минус:** слишком малые ячейки моделирования и малые времена



**Нет возможности детального рассмотрения явлений более крупного масштаба**

Брэннигэн и др. оценили время, необходимое для полноатомного расчета небольшого участка мембраны за время 1мс – 46 лет (G. Brannigan, L.C.L. Lin, F.L.H. Brown, Eur. Biophys. J. Biophys. Lett. 35 (2) (2006) 104–124)

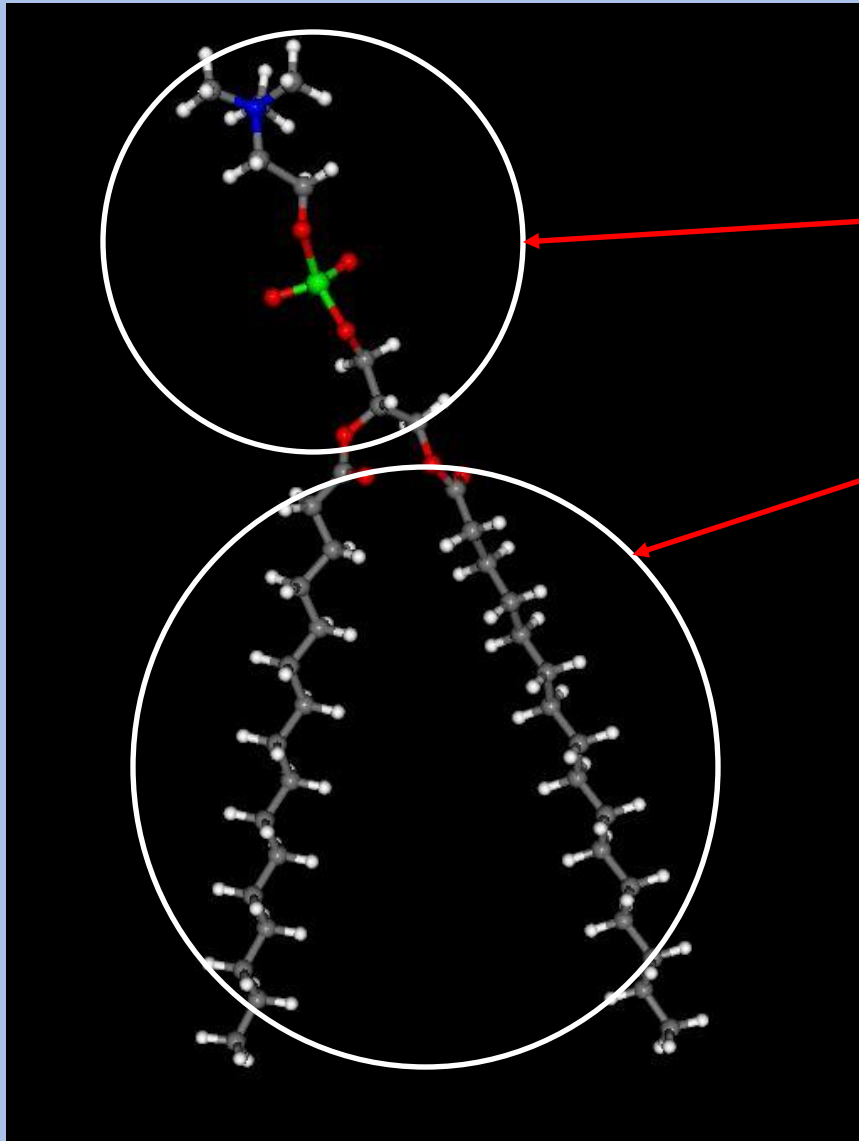
# Крупнозернистые модели



Огрубление по методу MARTINI

*S.V. Bennun et al. / Chemistry and Physics of Lipids 159  
(2009) 59–66*

# Липиды



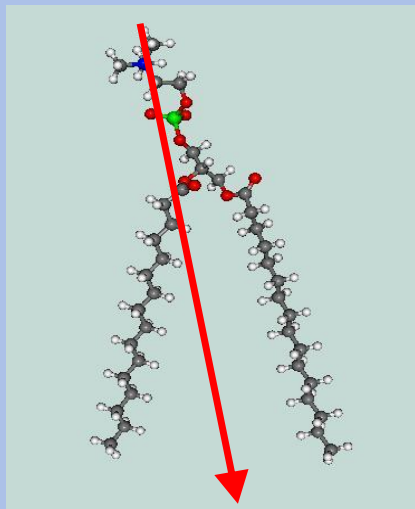
Полярная «голова»

Неполярные  
«хвосты»

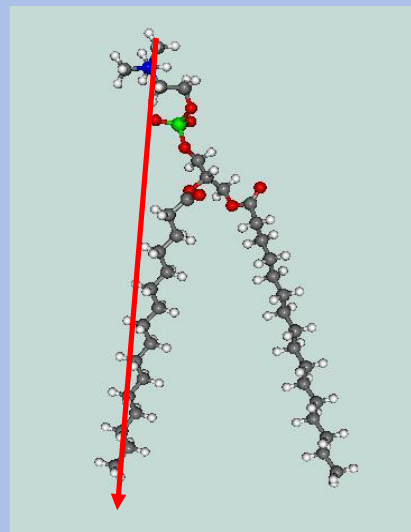
Липиды –  
амфифильные  
молекулы

# Типы деформаций

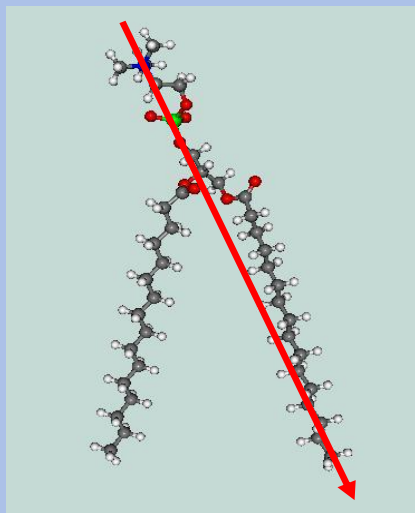
1 →



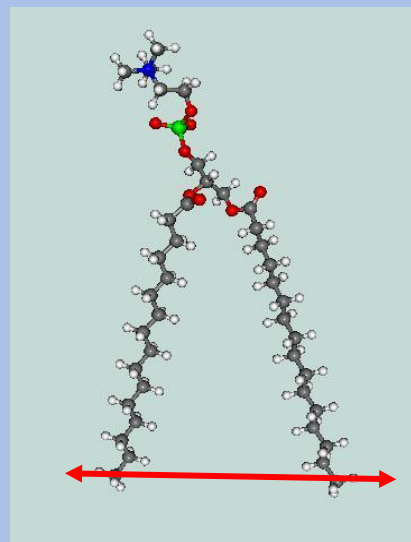
← 3



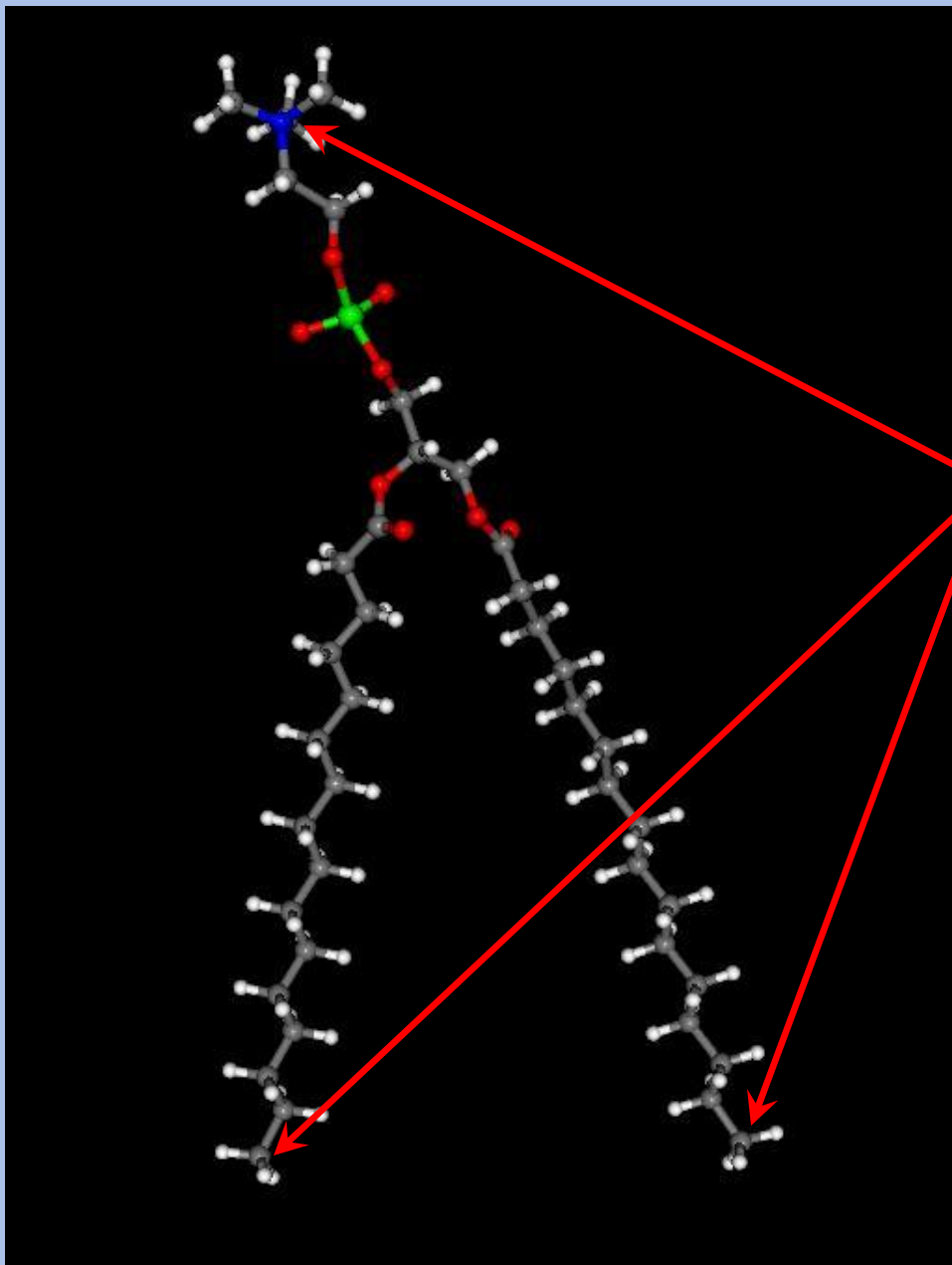
2 →



← 4



# Оптимизация геометрии молекулы



Создание деформированной молекулы



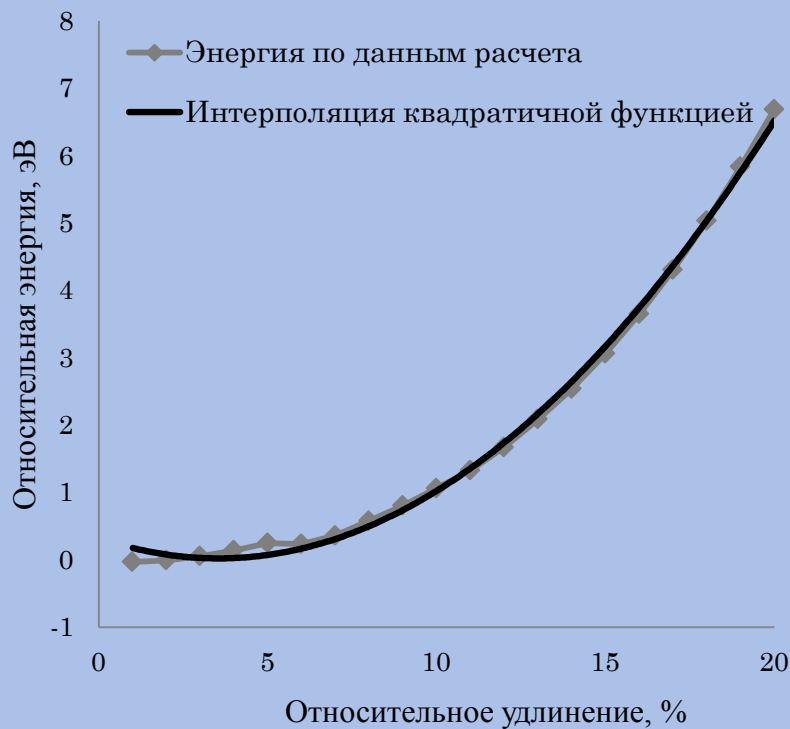
Атомы «закреплены»



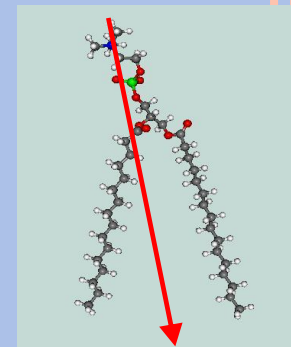
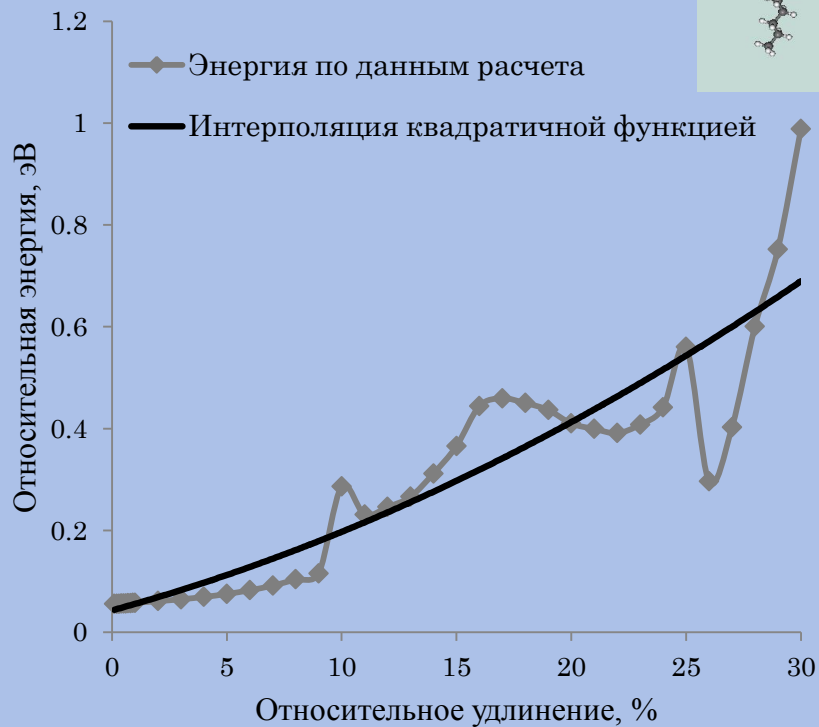
Оптимизация геометрии методом Хартри-Фока

# Деформации молекулы. Растяжение. Зависимость полной энергии молекулы от относительного удлинения

1

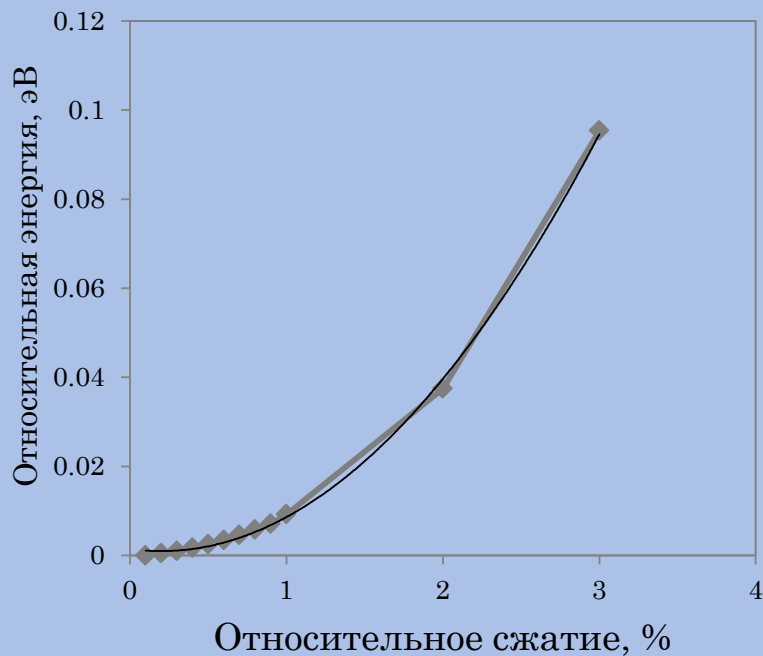


1'

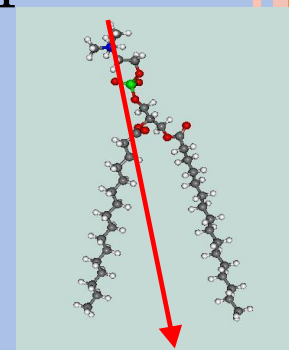
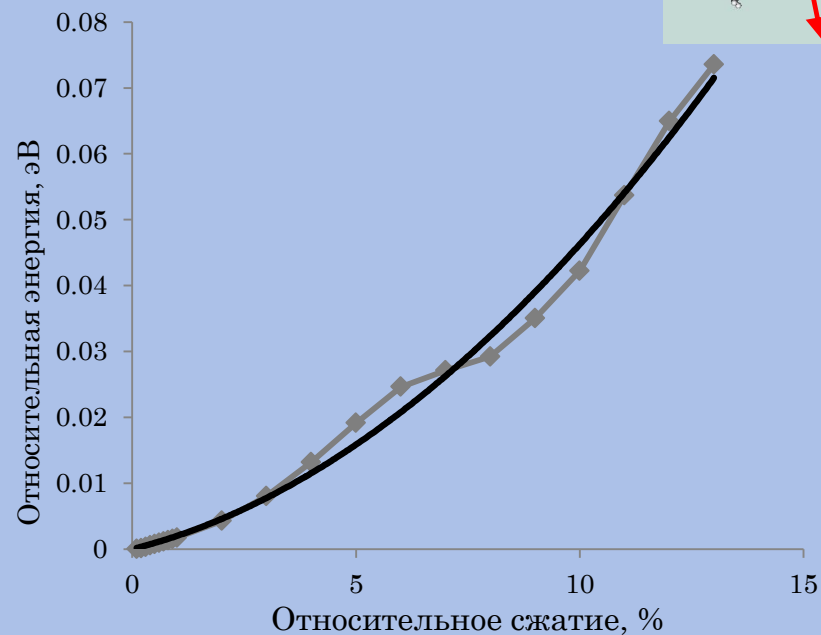


# Деформации молекулы. Сжатие. Зависимость полной энергии молекулы от относительного сжатия

1

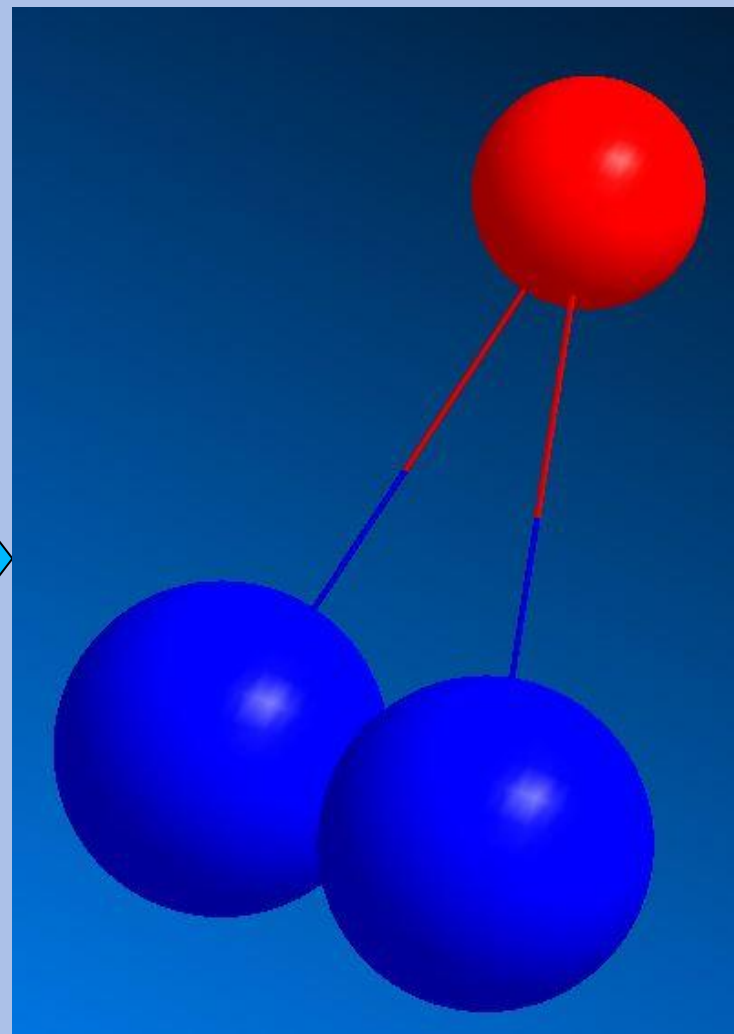
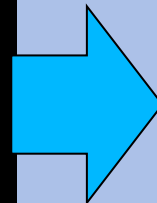
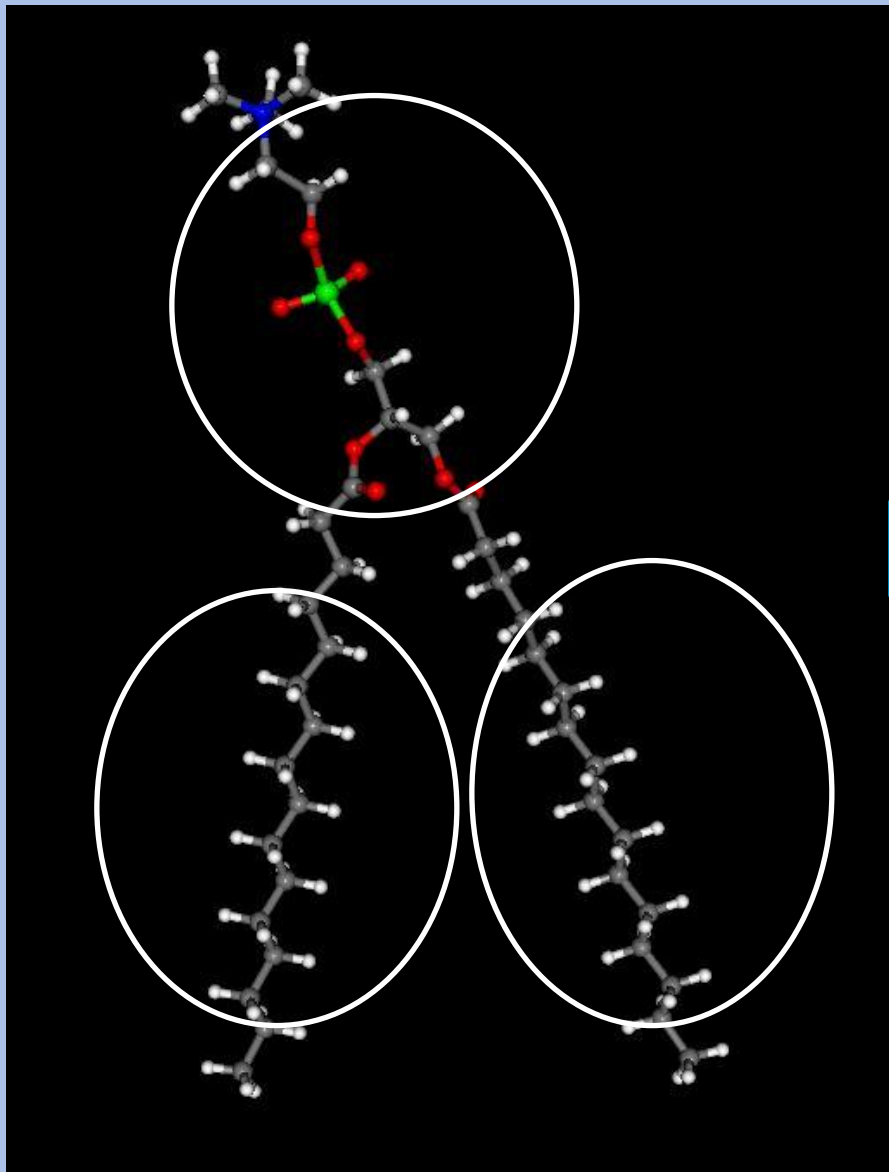


1'





# Модель



# Заключение

- Была продемонстрирована возможность использования для оценки параметров межчастичного взаимодействия в крупнозернистых моделях данных, полученных с помощью первопринципных методов
- Предложенный подход
  - позволяет выявить относительно жесткие фрагменты в молекуле
  - оправдывает применение той или иной формы межчастичного потенциала (например, гармонического)
  - позволяет оценить его параметры

Спасибо за внимание!

