

Simulace of procesů v buněčných membránách

Abstrakt

Mnoho důležitých procesů v buňkách probíhá prostřednictvím iontů. Například fúze synaptických váčků s membránami nervových buněk je kontrolována dvojmocným kationtem Ca^{2+} , zatímco výměna Na^+ a K^+ řídí rychlý elektrický přenos vzruchů neurony. Vyšetřili jsme modelové fosfolipidové membrány a jejich interakce s těmito biologicky relevantními ionty. S použitím molekulárně dynamických simulací jsme přesně určili jejich vzájemé afinity vůči neutrálním a negativně nabitým fosfolipidovým dvojvrstvám. K tomu bylo nutné vyvinout nové vylepšené modely fosfolipidů nazvané ECC-lipids, které obsahují polarizaci elektronů pomocí korekce na elektronové kontinuum implementované přeskálováním nábojů. Naše simulace s tímto novým silovým polem poprvé dosahují kvantitativní shody s experimentálně zjištěným konceptem lipidového elektrometru pro POPC a i pro POPS se všemi studovanými kationty. Kromě toho jsme také zkoumali vliv transmembránového napětí na fosfolipidové dvojvrstvy. Elektrické pole indukované napětím se vyskytuje výhradně v hydrofóbní části membrány, kde má téměř konstantní intenzitu. Toto pole ovlivňuje strukturu blízkých molekul vody, která je podstatným faktorem při elektroporaci membrán.