

Движение подвижных переносчиков

В модели молекулы пластоцианина рассматриваются как броуновские частицы, совершающие поступательное и вращательное движение в вязкой среде. На них действует случайная сила, возникающая из-за столкновений с молекулами среды, и внешняя электростатическая сила. Как показано в (Дой and Эдвардс 1999), для описания такого процесса можно использовать уравнение Ланжевена, описывающее изменение каждой координаты со временем под действием случайной и внешней сил.

Уравнение Ланжевена для поступательного движения имеет вид:

$$\xi_{tr}^x \frac{dx}{dt} = f_x(t) + F_x,$$

где x – координата, вдоль которой рассматривается движение, ξ_{tr}^x – коэффициент вязкого трения вдоль этой координаты, $f_x(t)$ и F_x – проекции случайной и электростатической сил на ось x , соответственно.

Уравнение Ланжевена для вращательного движения:

$$\xi_{rot}^x \frac{d\varphi}{dt} = m_x(t) + M_x,$$

где φ – угол поворота вокруг оси x , относительно которой рассматривается движение, ξ_{rot}^x – коэффициент вязкого трения относительно этой оси, $m_x(t)$ и M_x – моменты случайной и электростатической сил относительно оси x , соответственно.

Случайная сила $f_x(t)$ распределена нормально с нулевым средним и дисперсией, равной $\frac{2kT\xi_{tr}^x}{\Delta t}$. Здесь k – постоянная Больцмана, T – температура, Δt – шаг по времени. Для упрощения расчетов коэффициентов вязкого трения в модели молекулы пластоцианина и цитохрома f представлялись как эллипсоиды вращения с осями $2a$, $2b$ и $2c$ ($2a$ – ось вращения, $b = c$, рис. 1).

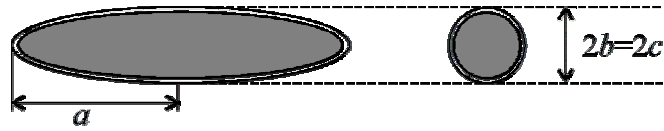


Рис. 1. Эллипсоид вращения.

Трёхмерная модель молекул строилась по данным Protein Data Bank (2PCF – 9-я структура). Оси и размеры эллипсоидов выбирались таким образом, чтобы момент инерции относительно оси вращения (оси $2a$) был минимальным, а моменты инерции исходной молекулы и соответствующего ей эллипсоида совпадали при условии однородной плотности эллипсоида. Получившиеся эллипсоиды вращения хорошо описывают форму рассматриваемых объектов (рис. 2).

Коэффициенты вязкого трения для эллипсоида вращения при движении вдоль и вращении относительно осей эллипсоида определяются по формулам (Bloomfield 2000):

$$\xi_{tr}^a = \frac{8\pi\eta R \cdot (p^2 - 1)^{3/2}}{\sqrt[3]{p} \cdot [(2p^2 - 1) \cdot \ln(p + \sqrt{p^2 - 1}) - p \cdot \sqrt{p^2 - 1}]}$$

$$\xi_{tr}^b = \frac{16\pi\eta R \cdot (p^2 - 1)^{3/2}}{\sqrt[3]{p} \cdot [(2p^2 - 3) \cdot \ln(p + \sqrt{p^2 - 1}) + p \cdot \sqrt{p^2 - 1}]}$$

$$\xi_{rot}^a = \frac{16\pi\eta R^3 \cdot (p^2 - 1)^{3/2}}{3p \cdot [p \cdot \sqrt{p^2 - 1} - \ln(p + \sqrt{p^2 - 1})]}$$

$$\xi_{rot}^b = \frac{16\pi\eta R^3 \cdot (p^2 - 1)^{3/2} (p^2 + 1)}{3p \cdot [(2p^2 - 1) \cdot \ln(p + \sqrt{p^2 - 1}) - p \cdot \sqrt{p^2 - 1}]}$$

Здесь ξ_{tr}^a , ξ_{tr}^b и ξ_{rot}^a , ξ_{rot}^b – коэффициенты трения относительно осей a и b для поступательного и вращательного движения, соответственно, η – вязкость среды, $2a$ – ось вращения, $b = c$, $p = a/b$, $R = \sqrt[3]{a \cdot b \cdot b}$.

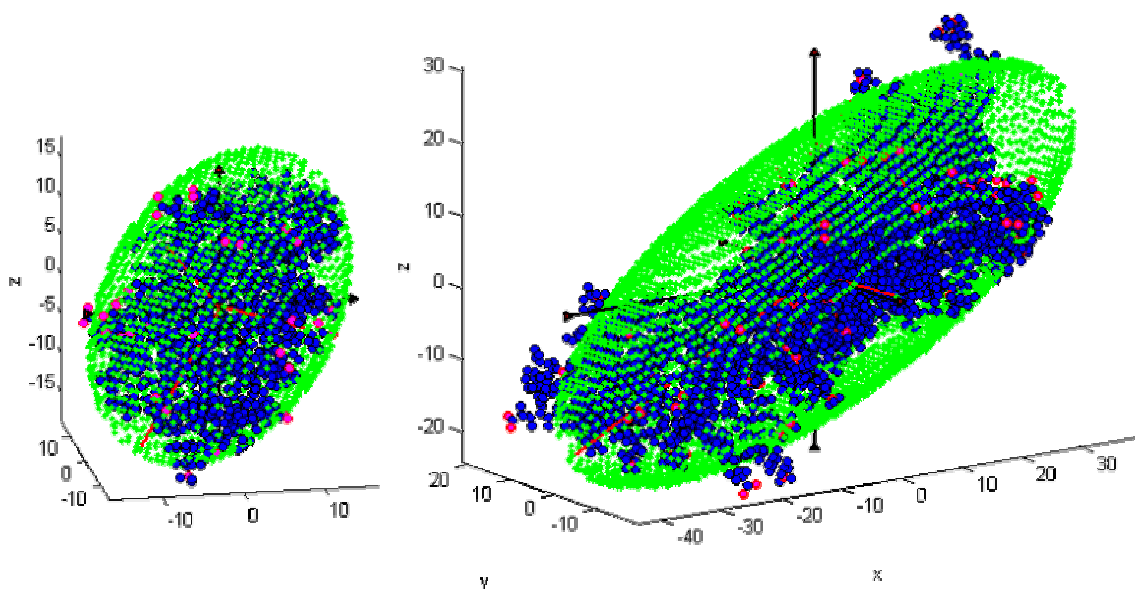


Рис. 2. Интерпретация молекул пластоцианина (слева) и цитохрома f (справа) эллипсоидами вращения.

Для описания рассматриваемой области моделирования (модельной сцены) задается ортогональная система координат модельной сцены. На границах области моделирования используются зеркальные граничные условия. С каждым объектом модельной сцены (т.е. с белками – подвижными переносчиками электрона) связывается отдельная (собственная) система координат. Собственная система координат любого объекта совмещена с осями соответствующего эллипсоида. Выбор такой системы координат обусловлен тем, что в ней известны коэффициенты вязкого трения для эллипсоида.

Уравнение Ланжевена решается численно в собственной ортогональной системе координат, совмещенной с осями эллипсоида: на каждом шаге в модели вычисляются смещения эллипсоида вдоль его осей и повороты вокруг его осей под действием броуновской силы. Найденные в собственной системе координат значения перемещений и поворотов затем пересчитываются в перемещения и повороты в лабораторной системе координат. Положение любого объекта в модели задается смещением и матрицей поворота собственной системы координат относительно лабораторной системы координат.