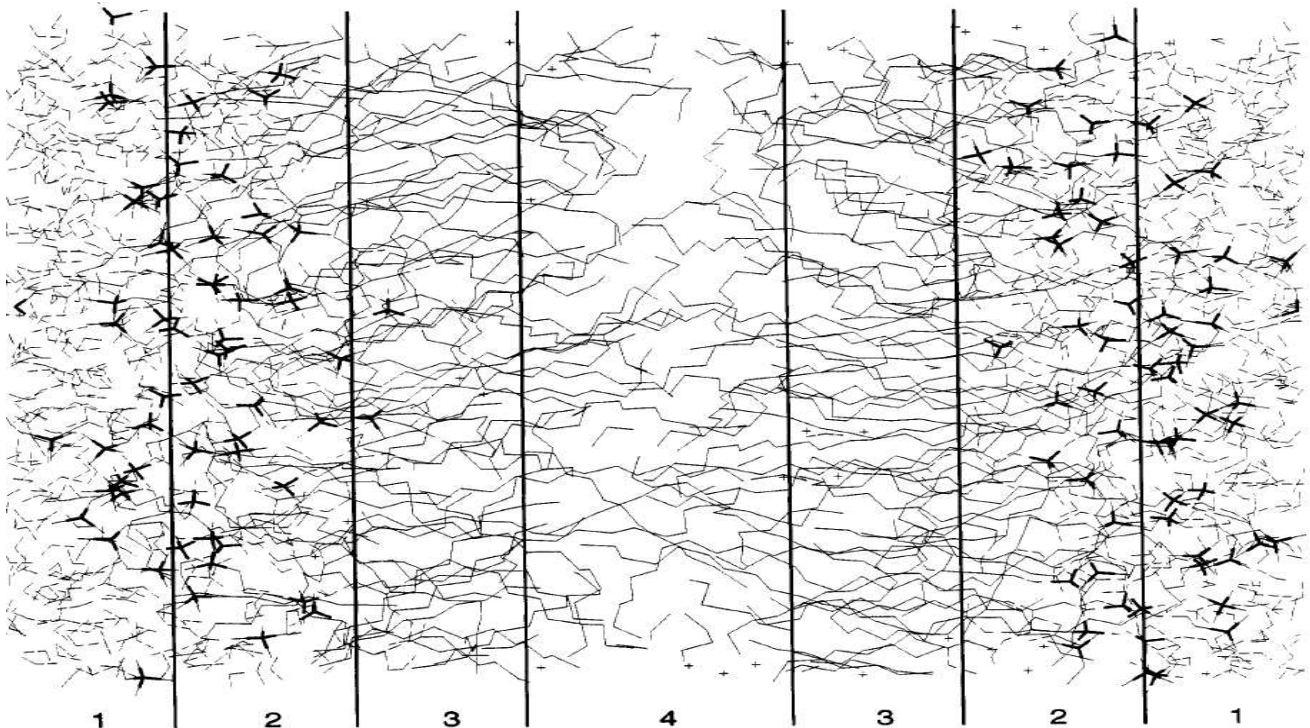


지질막을 통한 수운송 시뮬레이션

지질막을 통한 수분 침투 과정에 대한 통찰력을 얻기 위해 원자 디테일이 있는 인지질(DPPC)/물 시스템에서 분자 역학 시뮬레이션을 수행했다. 실제 침투 과정은 너무 느려서 직접 연구할 수 없기 때문에, 우리는 이중층을 가로지르는 물 분자의 자유 에너지 및 확산 속도 프로파일 계산을 통해 간접적으로 침투율을 추론했다. 우리는 지질막을 통한 물의 침투가 단순한 균질 용해도 확산 모델로는 적절하게 설명될 수 없다고 결론짓는다. 과도한 자유 에너지와 확산 속도는 막의 비균질적 특성으로 인해 막 내의 위치에 크게 의존한다. 계산된 과잉 자유 에너지 단면이 얇은 경사와 26적인 몰당 에너지 측정의 최대 키가 크다. 그 확산율이 지방 밀도 낮은 세포막의 중간에서 가장 높다. 는 계면 지역에서는 거의 모든 물 분자는 지질 headgroups에 의해 확산 규모 작의 1순위로 밝혀지고 있었다. 총 수송 과정은 본질적으로 자유 에너지 장벽에 의해 결정된다. 지방층 꼬리의 저항 가장 높은 울창한 부분을 통해 그 rate-limiting 단계는 침투다. 우리는 만약 시뮬레이션의 온도에 대해 수정 7(f)X1의 보급률 350K의, DPPC 세포막 실험적인 가치에 이런 비슷한 2cm/s t를 발견했다. 계정에 그 막의 불균등을 꺼내고, 우리가 더 “2” solubilitydiffusion 모델보다 현실적이 되는 듯한 새로운 “four-region” 모델을 정의한다

키워드

Water Permeation, membrane, Biological Relevance



[시뮬레이션된 막의 스냅샷. 점선은 물 분자에 사용되며 굵은 선은 콜린 및 인산기에 사용된다. 베를 선은 서로 다른 영역 간의 경계를 나타낸다. 교차는 경계 평면에 의해 절단된 결합으로 인해 발생한다.]

원 제 목	Simulation of water transport through a lipid membrane
출 처	BIOSON Research Institute
원 저 자	Siewert-Jan Marrink and Herman J.C. Berendsen