

**П.Г. Полищук:** В литературе много работ, посвященных изучению мембран в рамках МД. Есть ли исследования аналогичные Вашим и в чем их отличие?

**В.И. Покровский:** Да, подобные исследования проводились. В работах по данной тематике (например: DOI: 10.1021/ja7103558 DOI: 10.1021/la102454m) авторы указывают на наличие согласованных движений липидов при проведении МД эксперимента. В более поздних статьях авторы фокусируются как правило на больших временных масштабах и размерах системы, исключая из внимания детальное поведение молекул. В своей работе я хочу сфокусироваться на более тщательном изучении механизма возникновения согласованных движений. Хочется понять каков масштаб эффекта согласованности и в чём заключается его детальный механизм.

**П.Г. Полищук:** Достаточно ли 128 молекул (фактически квадратного участка 11 на 11) для выводов о согласованном перемещении отдельных молекул? Симуляция проводилась в условиях periodic boundary box? Если да, то не могли ли движения одной молекулы в одной части участка влиять на молекулы в другой стороны участка из-за periodic box?

**В.И. Покровский:** Безусловно размер системы невелик. Я работаю с небольшой по размеру системой поскольку на ней хочу верифицировать алгоритм поиска и анализа траектории движения липидов. Влияние periodic boundary conditions безусловно оказывает влияние на результат моего исследования. Использование небольшой системы для анализа обусловлено сильным увеличением сложности обработки данных МД при увеличении её размеров. В дальнейшем, конечно же, планируется анализировать системы большего размера для оценки влияния pbc и минимизации негативного эффекта, полученного от них.

**П.Г. Полищук:** На слайдах 6 и 7 нет подписей к осям. Только догадываюсь что на них изображено.

**В.И. Покровский:** Слайд 6: слева представлен фрагмент участка липидного монослоя по осям отмечены координат липидов в Ангстремах. На графике справа OY: значение функции проекции цветного вектора на общее направление (чёрный вектор); OX: время в пикосекундах. Снизу справа корреляционная матрица где по осям отмечены номера липидов в исследуемой системе.

Слайд 7: Карта слева - по осям координаты липидов в ангстремах. Для функций справа по оси абсцисс отложено время, соответствующее времени анализа (для которого строится карта перемещений), а по осям координат значения соответствующих функций (их названия даны в заголовке к графикам).

**П.Г. Полищук:** Что значит проекции траектории? Проекция каких координат и на что?

**В.И. Покровский:** Имеется в виду проекция вектора перемещения (воспользуемся левой картой перемещений липидов со слайда 6) цветных векторов, соответствующих перемещениям липидов за время = 1 пс на перемещение, соответствующее временному окну анализа (чёрный вектор). Результат проекции представлен справа на слайде 6. Чем большее по величине значение проекции, тем большее перемещение совершает молекула липида в сторону анализа (чёрный вектор) и наоборот.

**П.Г. Полищук:** Сколько раз запускали подобную симуляцию? Насколько хорошо воспроизводится общая картина? Может в ней есть какие-то паттерны?

**В.И. Покровский:** Подобная симуляция была запущена 3 раза (с одними и теми же параметрами МД), также алгоритм применялся и для других липидных бислоёв. В целом картина согласованности воспроизводится. Пока не похоже, что согласованность в движении липидов - артефакт вычислительного эксперимента. На счёт наличия паттернов могу утверждать, что картина возникновения согласованных движений носит аperiодический характер и наблюдается во всех исследуемых системах.