

УДК 541.64

## ГАМИЛЬТониан и характеристическое уравнение для обобщенной модели перехода спираль-клубок с учетом стекинга

А.В. БАДАСЯН, А.В. ГРИГОРЯН, А.Ю. ЧУХАДЖЯН,  
Е.Ш. МАМАСАХЛИСОВ, В.Ф. МОРОЗОВ

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 16 января 2002 г.)

Построен гамильтониан, описывающий влияние взаимодействия ближайших соседей в обобщенной модели полипептидной цепи. Этот гамильтониан моделирует вклад стекинг-взаимодействий на фоне кооперативности, сформированной энтропийной невыгодностью петель малой длины. Полученные трансфер-матрица и характеристическое уравнение для данного гамильтониана имеют схожую структуру с трансфер-матрицей и характеристическим уравнением исходной модели. Рассмотрено влияние стекинг-взаимодействий на температуру и интервал плавления. Показано, что стекинг приводит к увеличению стабильности двойной спирали и уменьшению кооперативности.

Ранее [1,2] была сформулирована модель и построен гамильтониан для описания перехода спираль-клубок в двухцепочечной ДНК. Гамильтониан такой модели основан только на факте комплементарного спаривания азотистых оснований. Кооперативность системы обеспечивается неаддитивностью петлевого фактора, все остальные виды взаимодействий в данном гамильтониане не рассматриваются. В этих работах было также показано, что двухцепочечная система может быть описана и в рамках «обобщенной модели полипептидной цепи» [3,4] с гамильтонианом Поттс-подобной модели. Таким образом, наша модель рассматривает проблему кооперативности ДНК с нетрадиционных позиций, определяя ее только через неаддитивность петлевого фактора, в то время как общепринятый подход определяет кооперативность через так называемые «стекинг-взаимодействия». Суть стекинга проста. Азотистые основания, будучи плоскими гетероциклическими гидрофобными соединениями, имеют тенденцию к упорядочению наподобие стопки (stacking) монет – столбиком.

Целью настоящей работы является учет «стекинг-взаимодействий» ближайших соседей в рамках гамильтониана нашей модели и выявление роли этого типа взаимодействий на фоне водородных связей.

Гамильтониан нашей модели имеет вид [3,4]

$$-\beta H = J \sum_{i=1}^N \prod_{k=\Delta-1}^0 \delta(\gamma_{i-k}, 1) = J \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta)}. \quad (1)$$

Здесь  $\gamma = 1, 2, \dots, Q$  есть спиновая переменная, имеющая смысл номера конформации,  $J = U/kT$  – приведенная энергия образования водородной связи,  $\Delta$  – число повторяющихся единиц, фиксированных одной водородной связью.

Характеристическое уравнение для системы с гамильтонианом (1) имеет вид

$$\lambda^{\Delta-1} (\lambda - (V+1)) (\lambda - Q) = V(Q-1). \quad (2)$$

Поскольку смысл гамильтониана (1) заключается в том, что энергия водородной связи выделяется тогда и только тогда, когда  $\Delta$  подряд повторяющихся единиц находятся в конформации номер 1, определенной как спиральная конформация, то, следовательно, в гамильтониан такой модели, помимо базового члена (1), будет включен новый член, определяемый базовой моделью с  $\Delta = 2$ . Таким образом, гамильтониан системы с учетом стекинга будет иметь вид

$$-\beta H = \sum_{i=1}^N (J \delta_i^{(\Delta)} + I \delta_i^{(2)}). \quad (3)$$

Здесь  $J$ , как и прежде, является приведенной энергией образования водородной связи и фиксирует в конформации номер 1  $\Delta$  последовательных повторяющихся единиц, а  $I = E/kT$  есть приведенная энергия стекинг-взаимодействия и фиксирует в конформации 1 две последовательные повторяющиеся единицы.

Характеристическое уравнение для гамильтониана (3) будет иметь следующий вид:

$$\lambda^{\Delta-2} (\lambda - W) (\lambda - \tilde{Q}) (\lambda - \tilde{R}) = R^{\Delta-2} (W - R) (Q - 1), \quad (4)$$

где  $W = \exp(J+I)$ ,  $R = \exp I$ ,  $VR = W - R$ ,

$$\begin{aligned} \tilde{Q} &= Q + \left( \sqrt{(Q-R+1)^2 / 4 + R - 1} - (Q-R+1)/2 \right), \\ \tilde{R} &= R - 1 - \left( \sqrt{(Q-R+1)^2 / 4 + R - 1} - (Q-R+1)/2 \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Очевидно, что при  $I = 0$ ,  $R = 1$  (4) переходит в (2).

Рассмотрим случай, когда энергии стекинга и энергии водородной связи одного порядка. Поскольку переход спираль-клубок происходит в узком температурном интервале, соответствующем  $W \approx Q$ , то, следовательно, можно принять  $W \approx R^2 \approx Q$ . Отсюда следует [1,2], что при  $Q \approx 3$  величина  $\tilde{R}$  становится близкой к нулю. Таким образом, в левой

части векового уравнения (4) можно ею пренебречь и переписать его в виде

$$\lambda^{\Delta-1}(\lambda - W)(\lambda - \tilde{Q}) = W^{(\Delta-2)/2}(W-1)(Q-1). \quad (6)$$

Сравнивая (6) и (2), мы замечаем, что роль температурного параметра  $V+1 = \exp J$  играет  $W = \exp(J+I)$ , а правая часть содержит дополнительный множитель  $R^{\Delta-2}$ . Для выявления роли стекинга приведем (2) и (6) к зимм-брэгговскому виду

$$(x-1)(x-s) = s\sigma. \quad (7)$$

Для этого в уравнении (2) сделаем подстановку  $\lambda = x(V+1)$ ,  $s = Q/(V+1)$ , а в уравнении (6)  $\lambda = xW$ ,  $s = Q/W$  и, учитывая, что вблизи точки перехода  $s=1$  и  $x \approx 1$ , вековые уравнения (2) и (6) переписутся соответственно как

$$(x-1)(x-s) = (s-1/Q)(Q-1)/Q^{\Delta-1}, \quad (8)$$

$$(x-1)(x-s) = (s-1/Q)(Q-1)/Q^{(\Delta-1)/2}. \quad (9)$$

Из этих уравнений видно, что с одной и той же точностью до величины  $1/Q$  оба вековых уравнения сводятся к зимм-брэгговскому виду. Точка перехода, определяемая для базового гамильтониана как  $V+1=Q$  или  $T_c = U/\ln Q$ , для гамильтониана со стекингом будет определяться  $W=Q$  или  $T_c = (U+E)/\ln \tilde{Q}$ . Поскольку  $\tilde{Q}$  незначительно отличается от  $Q$ , то стекинг-взаимодействие действительно увеличивает температуру перехода, что естественно, поскольку мы учли дополнительный вклад, стабилизирующий спиральную структуру. Иное дело с параметром кооперативности. В отличие от базовой модели, он уменьшается, что приводит к увеличению интервала перехода. Во всех среднестатистических теориях кооперативность определялась именно стекинг-взаимодействием. Этот парадоксальный результат требует дальнейшего внимательного рассмотрения. Однако и сейчас можно с определенностью сказать, что на фоне сильной кооперативности, определяемой невыгодностью петель малой длины, вклад стекинга может привести только к потере однородности петли, и, следовательно, к потере кооперативности.

Работа выполнена благодаря гранту CRDF AB2-2006.

## ЛИТЕРАТУРА

1. В.Ф.Морозов, Е.Ш.Мамасакхлисов, М.С.Шагинян. Изв. НАН Армении. Физика, 33, 195 (1998).
2. V.F.Morozov, E.Sh.Mamasakhlisov, Sh.Hayryan, Chin-Kun Hu. Physica A, 281, 51 (2000).
3. N.S.Ananikyan, Sh.A.Hayryan, E.Sh.Mamasakhlisov, V.F.Morozov. Biopolymers 30, 357 (1990).
4. Sh.A.Hayryan, E.Sh.Mamasakhlisov, V.F.Morozov. Biopolymers, 35, 75 (1995).