

УДК 541.64

ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ ПОЛИПЕПТИДНОЙ ЦЕПИ С ДВУМЯ МАСШТАБАМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Ш.А. ТОНОЯН, Т.Ю. БУРЯКИНА, А.В. ЦАРУКЯН,
Е.Ш. МАМАСАХЛИСОВ, В.Ф. МОРОЗОВ

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 4 мая 2007 г.)

На основании введенной нами ранее обобщенной модели полипептидной цепи (ОМПЦ), которая описывает переход спираль-клубок как в полипептидах, так и в полинуклеотидах, предложена модель с гамильтонианом, который состоит из двух гамильтонианов ОМПЦ с различными масштабами взаимодействия. В рамках трансфер-матричного подхода вычислены степень спиральности и корреляционная длина. Показано, что модель с двумя масштабами взаимодействия можно свести к одномасштабной модели с переопределенным параметром замыкания водородной связи.

1. Введение

Широко известно, что спиральная структура ДНК обусловлена наличием двух типов взаимодействий, накладывающих ограничения на конформационные состояния ближайших соседствующих повторяющихся единиц. Первым взаимодействием является водородное связывание комплементарных пар оснований двух антипараллельных цепей, расположенных друг против друга. Второе взаимодействие, известное как стекинг, определяется гидрофобным притяжением между ближайшими соседствующими плоскими гетероциклическими азотистыми основаниями, что приводит к их параллельной упаковке наподобие стопки монет. Водородное связывание накладывает ограничение на конформационные состояния повторяющихся единиц на некотором конечном масштабе, большем, чем ближайшие соседи, в то время как стекинг взаимодействует на масштабе ближайших соседей.

Каждое из взаимодействий по отдельности приводит к кооперативности перехода спираль-клубок. Для исследования совместного влияния этих двух взаимодействий нужна теория, учитывающая различие в масштабах взаимодействий.

Исследование совместного сосуществования взаимодействий различных масштабов имеет еще и следующее приложение. Так, биополимеры *in vivo* компактизованы в структуры различной природы. Например, ДНК в бактериофагах и вирусах упакована в капсид, размеры которого сравнимы с

длиной жесткости ДНК.

Известно также, что природные белки находятся в глобулярном состоянии, возникающем из-за отталкивания между гидрофобными повторяющимися единицами и водой. Это отталкивание принято моделировать как отталкивание от стенок сферической полости. Таким образом, представляет большой интерес учет влияния на переход спираль-клубок полости, которая связана с взаимодействием масштаба, отличного от масштаба, приводящего к спиральному состоянию.

Ранее [1] нами было исследовано совместное влияние на переход спираль-клубок в ДНК водородного связывания и стекинга как взаимодействия ближайших соседей и взаимодействия на порядок большего масштаба.

В данной статье исследуется обобщенная модель полипептидной цепи (ОМПЦ) с двумя масштабами взаимодействия. На основе этой модели с единых позиций и в обобщенном виде можно будет исследовать стабильность и кооперативность ДНК под влиянием стекинга и других мелкомасштабных взаимодействий, а также крупномасштабных взаимодействий, таких, как водородное связывание или ограничение на предельную длину регулярной спиральной последовательности.

2. Базовая модель (ОМПЦ)

Ранее [1-7] нами была предложена микроскопическая теория перехода спираль-клубок, приемлемая как для полипептидов, так и для ДНК. Поскольку дальнейшие исследования будут проводиться на ее основе, приведем ее основные положения, как базовой модели.

Гамильтониан ОМПЦ имеет вид

$$-\beta H = J \sum_{i=1}^N \delta(\gamma_{i-\Delta+1}, 1) \delta(\gamma_{i-\Delta+2}, 1) \dots \delta(\gamma_{i-1}, 1) \delta(\gamma_i, 1) = J \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta)}, \quad (1)$$

где $\beta = T^{-1}$, N – число повторяющихся единиц, $J = U/T$ – энергия водородной связи, приведенная к температуре, $\delta(\gamma_i, 1)$ – символ Кронекера, γ_i – переменная, описывающая конформацию одной повторяющейся единицы и принимающая значения от 1 до Q . (Q – число конформаций одной повторяющейся единицы: $\gamma_i = 1$ означает, что повторяющаяся единица находится в спиральном состоянии, остальные $(Q-1)$ конформаций соответствуют клубкообразному состоянию.) Произведение символов Кронекера $\delta_i^{(\Delta)} = \prod_{k=\Delta-1}^0 \delta(\gamma_{i-k}, 1)$ обеспечивает выделение энергии J только в том случае, когда Δ подряд соседних повторяющихся единиц находятся в спиральной конформации, обозначенной нами номером 1. Трансфер-матрица ОМПЦ для конкретных значений Δ и Q на базе гамильтониана (1) имеет вид матрицы $(\Delta \times \Delta)$, где все элементы первой строки равны $V = e^J - 1$; все элементы первой нижней псевдодиагонали равны 1; элемент (Δ, Δ) равен Q ; все остальные элементы равны нулю:

$$G(\Delta \times \Delta) = \begin{pmatrix} V & V & \dots & V & V & V \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & Q \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Было показано [2], что трансфер-матрица модели может быть также представлена в виде

$$G(\Delta \times \Delta) = \begin{pmatrix} V+1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & Q-1 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & Q-1 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Здесь элемент (1,1) равен $e^J = V+1$, все элементы последней строки равны 1; элементы первой верхней псевдодиагонали равны 1; элементы $(\Delta-1, \Delta)$ и (Δ, Δ) равны $Q-1$; все остальные элементы равны нулю.

Статистическая сумма в термодинамическом пределе для обеих трансфер-матриц модели имеет вид

$$Z = \text{Tr} G^N = \text{Tr} A \Lambda^N B = \sum_{k=1}^{\Delta} \lambda_k^N, \quad (4)$$

где использованы левые A и правые B собственные векторы трансфер-матрицы G , а λ_k — собственные значения матрицы G , которые определяются характеристическим уравнением

$$\lambda^{\Delta-1}(\lambda - (V+1))(\lambda - Q) = V(Q-1). \quad (5)$$

Учитывая теорему Фробениуса — Перрона [8], в термодинамическом пределе

$$Z = \lambda_1^N,$$

где λ_1 — главное собственное число матрицы G .

На основе трансфер-матричного представления ОМПЦ были вычислены усредненные величины теории, которые могут быть либо измерены экспериментально, либо помогают осмыслению деталей процесса перехода спираль — клубок [1-7].

Степень спиральности

Под степенью спиральности мы, как и другие авторы [9,10], будем понимать среднюю долю повторяющихся единиц, находящихся в спиральном состоянии или, другими словами, среднюю долю повторяющихся единиц,

связанных водородными связями. Для определения степени спиральности запишем статистическую сумму в виде

$$Z = \sum_{\{\gamma_i\}} \exp \left[J \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta)} \right]. \quad (6)$$

Непосредственным вычислением легко убедиться, что степень спиральности определяется следующим соотношением:

$$\theta = \langle \delta_i^{(\Delta)} \rangle = \frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial J}, \quad (7)$$

где $\langle \delta_i^{(\Delta)} \rangle$ – вероятность того, что и i -ая повторяющаяся единица находится в спиральном состоянии. Как видно из (7), θ не зависит от i , и в термодинамическом пределе степень спиральности выражается через главное собственное число λ_1 :

$$\theta = \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial J}. \quad (8)$$

Таким образом, степень спиральности можно вычислить, используя характеристическое уравнение, однако для численных расчетов удобно использовать левые A и правые B собственные векторы трансфер-матрицы G . Из (7), пренебрегая влиянием границ в термодинамическом пределе, степень спиральности имеет вид

$$\theta = \frac{\text{Tr}(G'G^{N-1})}{Z} = \frac{\text{Tr}(BG'A)\Lambda^{N-1}}{Z} = \frac{(BG'A)_{11}}{\lambda_1}, \quad (9)$$

где $G' = \partial G / \partial J$.

Двухчастичная корреляционная функция и корреляционная длина

Двухчастичный пространственный коррелятор описывает взаимозависимость образования водородного связывания между i -ой и $(i+r)$ -ой повторяющимися единицами:

$$g_2(r) = \langle \delta_i^{(\Delta)} \delta_{i+r}^{(\Delta)} \rangle - \langle \delta_i^{(\Delta)} \rangle \langle \delta_{i+r}^{(\Delta)} \rangle = \langle \delta_i^{(\Delta)} \delta_{i+r}^{(\Delta)} \rangle - \theta^2, \quad (10)$$

где $\langle \delta_i^{(\Delta)} \delta_{i+r}^{(\Delta)} \rangle$ – вероятность того, что i -ая и $(i+r)$ -ая повторяющиеся единицы одновременно находятся в спиральном состоянии.

С помощью диагонализующего преобразования для матрицы G , в термодинамическом пределе для корреляционной функции получаем

$$g_2(r) = \frac{[(BG'A)\Lambda^{r-1}(BG'A)]_{11}}{\lambda_1^{r+1}} - \theta^2 = \sum_{k=2}^{\Delta} (BG'A)_{1k} (BG'A)_{k1} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_1} \right)^{r-1}, \quad (11)$$

где $(B\hat{m}'A)_{1k}$ и $(B\hat{m}'A)_{k1}$ – вектор-строка и вектор-столбец для главного собственного числа λ_1 . Асимптотическое поведение двухчастичной корреляции-

онной функции при $r \gg 1$ определяется следующим по модулю значением собственного числа λ_2 и может быть выражено как

$$g_2(r) = C \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right), \quad (12)$$

где

$$\xi = \ln\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^{-1}. \quad (13)$$

Величина ξ называется корреляционной длиной и показывает масштаб затухания корреляций вдоль цепи при $r \gg 1$.

3. Формулировка модели с двумя масштабами взаимодействий

Базовая ОМПЦ при описании перехода спираль-клубок учитывает лишь один Δ -частичный масштаб взаимодействия. Добавим член, описывающий дополнительное Δ_2 -масштабное взаимодействие, в гамильтониан ОМПЦ. Предполагая взаимодействия не влияющими друг на друга, оба взаимодействия запишутся в гамильтониане аддитивно:

$$-\beta H = J_1 \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta_1)} + J_2 \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta_2)}. \quad (14)$$

Первый член в правой части выражения (14) есть гамильтониан базовой модели, описывающий Δ_1 -частичные взаимодействия, второй член также есть гамильтониан базовой модели, но описывающий Δ_2 -частичные взаимодействия. Здесь $J_l = E_l / T$ ($l=1,2$) – приведенная энергия взаимодействий первого и второго типа. Дельта-символы Кронекера в гамильтониане описывают тот факт, что приведенные энергии J_l выделяются, когда Δ_l ближайших соседа находятся в спиральной конформации. Не ограничивая общности, предположим, что $\Delta_1 > \Delta_2$. Трансфер-матрица модели с гамильтонианом (14) имеет вид

$$G = \begin{pmatrix} VR & VR & \dots & VR & VR & VR & \dots & VR & VR \\ R & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & R & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & R & R-1 & R-1 & \dots & R-1 & R-1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & Q \end{pmatrix}, \quad (15)$$

или

$$G = \begin{pmatrix} W & R & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & R & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & R & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & Q-1 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & \dots & 1 & Q-1 \end{pmatrix}, \quad (16)$$

где $V = \exp[J_1] - 1$; $R = \exp[J_2]$; $W = \exp[J_1 + J_2]$; $VR = W - R$.

При $J_2 = 0$, $R = 1$ двухмасштабная модель переходит в одномасштабную базовую модель с гамильтонианом базовой модели (1) с Δ_1 -частичными взаимодействиями, и матрицы (15) и (16) переходят в матрицы (3) и (4) размерности $(\Delta_1 \times \Delta_1)$. При $J_1 = 0$, $V = 0$ аналогично получается Δ_2 -частичная базовая модель (1) с соответствующей ей трансфер-матрицей $(\Delta_2 \times \Delta_2)$.

Вековое уравнение для матриц (15) или (16) имеет вид

$$\lambda^{\Delta_1 - \Delta_2} [\lambda - R(V+1)] \left[\frac{\lambda^{\Delta_2 - 1} (\lambda - R)(\lambda - Q) - (R-1)(Q-1)}{\lambda - 1} \right] = VRR^{\Delta_1 - \Delta_2} (Q-1). \quad (17)$$

Введем параметр $\alpha = J_2 / (J_1 + J_2) = J_2 / J$. Это доля энергии Δ_2 -масштабного взаимодействия на фоне общей энергии. С учетом параметра α гамильтониан системы можно переписать следующим образом:

$$-\beta H = \sum J [(1-\alpha)\delta_i^{(\Delta_1)} + \alpha\delta_i^{(\Delta_2)}]. \quad (18)$$

Рассмотрим два случая:

1. $\alpha < 1$. Этот случай описывает влияние мелкомасштабных Δ_2 -взаимодействий на переход спираль-клубок, определяемый крупномасштабными взаимодействиями Δ_1 , причем, при $0 < \alpha < 1$ мелкомасштабное взаимодействие имеет характер притяжения, а при $\alpha < 0$ — отталкивания.

2. $\alpha > 1$. Этот случай приводит к отрицательной энергии крупномасштабных взаимодействий Δ_1 при положительной энергии мелкомасштабных взаимодействий Δ_2 . Он описывает влияние Δ_1 -масштабного ограничения на длину спирального участка на фоне базовой модели с Δ_2 -частичными взаимодействиями.

В настоящей статье рассматривается лишь случай 1.

4. Результаты и обсуждение

На основе гамильтониана (14) и трансфер-матрицы (16) была вычислена корреляционная длина ξ с использованием выражения (13). Это выражение универсально и поэтому может быть использовано для произвольной трансфер-матрицы. Вычисление степени спиральности для двухмасштабного гамильтониана (14) сопряжено с некоторой неоднозначностью. В то время как

для базового гамильтониана (1) степень спиральности определяется выражением (9), где $G' = \partial G / \partial J$, для двухмасштабного гамильтониана нам необходимо вычислить по той же формуле две величины – θ_1 и θ_2 , определяющие доли связей масштаба Δ_1 и Δ_2 . Вычисления показали, что температурное поведение обоих параметров отличается незначительно, поэтому мы не будем различать эти степени спиральности. Поскольку нами ожидалось, что точка перехода находится вблизи значения $e^J = Q$, то мы выбрали безразмерную температуру в виде $t = kT \ln Q / U$, т.е. $t_m = 1$. Расчеты показали, что это соотношение тем точнее, чем больше Q , так же как и в базовой модели.

Из температурной зависимости степени спиральности θ был вычислен Δt – интервал плавления (табл.1) для разных значений параметров. Для наглядности, как интервал плавления, так и максимальная корреляционная длина в таблице помещены в приведенном к случаю $\alpha = 0$ виде. Для $Q = 3$ $\xi_{\max 0} = 2841$, $\Delta t_0 = 5.6 \times 10^{-4}$, а для $Q = 4$ $\xi_{\max 0} = 21845$, $\Delta t_0 = 5.8 \times 10^{-5}$. Как видно из таблицы, росту α сопутствует расширение интервала плавления, причем положительным α соответствует увеличение, а отрицательным – уменьшение интервала плавления по сравнению с базовой моделью.

Табл.1. Поведение приведенного интервала плавления и приведенной корреляционной длины для случая $\Delta_1 = 16$ и $\Delta_2 = 3$.

α	$Q = 3$			$Q = 4$		
	$\xi_{\max} / \xi_{\max 0}$	$\Delta T / \Delta T_0$	$\xi_{\max} \Delta T / \xi_{\max 0} \Delta T_0$	$\xi_{\max} / \xi_{\max 0}$	$\Delta T / \Delta T_0$	$\xi_{\max} \Delta T / \xi_{\max 0} \Delta T_0$
-0.50	29.85	00.03	01.01	82.97	00.01	01.01
-0.45	21.14	00.05	01.01	52.65	00.02	01.00
-0.40	15.13	00.07	01.01	33.87	00.03	01.00
-0.35	10.76	00.09	01.01	21.93	00.05	01.01
-0.30	07.65	00.13	01.01	14.08	00.07	01.00
-0.25	05.45	00.18	01.00	09.07	00.11	01.00
-0.20	03.88	00.26	01.00	05.83	00.17	01.00
-0.15	02.76	00.36	01.01	03.75	00.27	01.01
-0.10	01.97	00.51	01.00	02.41	00.42	01.00
-0.05	01.40	00.71	01.00	01.55	00.64	01.00
0.00	01.00	01.00	01.00	01.00	01.00	01.00
0.05	00.71	01.40	01.00	00.64	01.55	01.00
0.10	00.51	01.96	01.00	00.41	02.41	01.00
0.15	00.36	02.73	00.99	00.27	03.72	00.99
0.20	00.26	03.81	00.99	00.17	05.79	01.00
0.25	00.19	05.31	00.99	00.11	08.94	01.00
0.30	00.13	07.40	00.99	00.07	13.81	00.99
0.35	00.10	10.31	00.99	00.05	21.35	00.99
0.40	00.07	14.30	00.99	00.03	32.89	00.99
0.45	00.05	19.86	00.99	00.02	50.96	01.00
0.50	00.04	27.50	00.99	00.01	78.51	01.00

Таким образом, притяжению для мелкомасштабных взаимодействий соответствует меньшая, по сравнению с базовой моделью, кооперативность, что находится в соответствии с ранее полученным результатом для $\Delta_2 = 2$ [1].

Новым является тот факт, что отталкивающий характер мелкомасштабных взаимодействий приводит к росту кооперативности. Эти результаты также подтверждаются поведением корреляционной длины. С ростом α до 0,5 она остается кривой с максимумом, а ее максимальное значение падает от большего, по сравнению с базовой моделью, значения при отрицательных α к меньшим при положительных. Такое поведение кооперативности может быть объяснено тем, что при положительном вкладе мелкомасштабных взаимодействий переход спираль-клубок сопровождается увеличением, по сравнению с базовой моделью, вклада спиральных участков меньшей длины. Это уменьшает статистический вес спиральных участков большей длины. Таким образом, переход спираль-клубок происходит в среднем меньшими участками, что и расширяет интервал перехода. Именно поэтому отрицательный вклад мелкомасштабного взаимодействия приводит к большей выгодности участков большей длины, что повышает в этом случае кооперативность двухмасштабной модели. Наряду с интервалом плавления и максимальной корреляционной длиной в таблице приведено поведение их произведения.

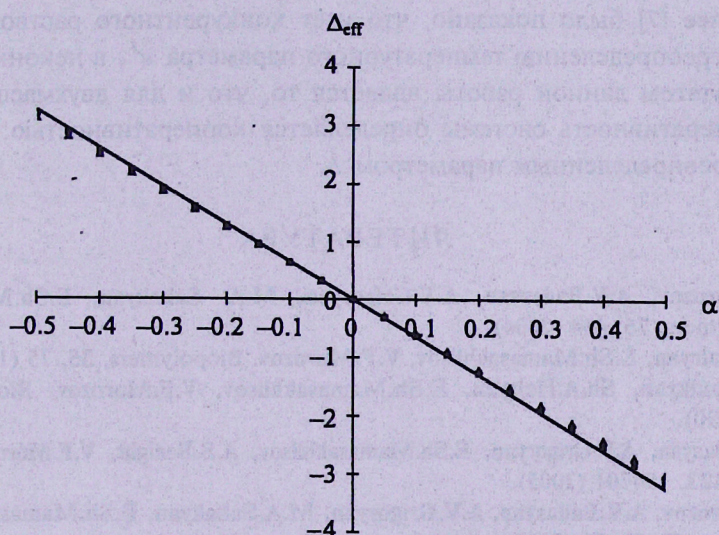


Рис.1. Поведение эффективного масштаба взаимодействия $\Delta_{eff} = \ln(\xi_{max} / \xi_{max0}) / \ln Q$ от α . $\Delta_1 = 16$, $\Delta_2 = 3$. $\triangle - Q = 3$, $\blacksquare - Q = 4$.

Из таблицы видно, что это произведение не меняется с изменением α , что свидетельствует о том, что, как и в базовой модели, эти величины несут одну и ту же информацию, т.е. для дальнейшего количественного описания кооперативности вполне достаточно исследовать только легко вычис-

ляемую корреляционную длину. Для количественного описания поведения максимальной корреляционной длины была исследована зависимость от α величины

$$\Delta_{\text{eff}} = \frac{\ln(\xi_{\text{max}} / \xi_{\text{max}0})}{\ln Q},$$

где ξ_{max} – максимальная корреляционная длина при заданном α , а $\xi_{\text{max}0}$ – максимальная корреляционная длина при $\alpha = 0$, т.е. для базовой модели при $\Delta = \Delta_1$ (рис.1). Из рисунка следует, что эта зависимость может быть описана прямой, проходящей через начало координат, причем с ростом Q расчетные точки ложатся на прямую с большей степенью точности. Из наклона прямой получаем $\Delta_{\text{eff}} = \alpha(\Delta_2 - \Delta_1)/2$. Поэтому при изменении Δ_1 и Δ_2 с сохранением разности между ними расчетные точки совпадают. Отсюда, поскольку для одномасштабной модели ранее нами была получена оценка максимальной корреляционной длины как $\xi_{\text{max}} = Q^{(\Delta-1)/2} / 2$, следует, что максимальная корреляционная длина для двухмасштабной модели описывается соотношением

$$\xi_{\text{max}} = \frac{1}{2} Q^{\frac{(1-\alpha)(\Delta_1-1) + \alpha(\Delta_2-1)}{2}}.$$

Ранее [7] было показано, что учет конкурентного растворителя приводит к переопределению температурного параметра e^J , а неконкурентного – Q . Результатом данной работы является то, что и для двухмасштабной модели кооперативность системы определяется кооперативностью базовой модели с переопределенным параметром Δ .

ЛИТЕРАТУРА

1. V.F.Morozov, A.V.Badasyan, A.V.Grigoryan, M.A. Sahakyan, E.Sh.Mamasakhlishov. Biopolymers, 75, 434 (2004).
2. Sh.A.Hairyan, E.Sh.Mamasakhlishov, V.F.Morozov. Biopolymers, 35, 75 (1995).
3. N.S.Ananikyan, Sh.A.Hairyan, E.Sh.Mamasakhlishov, V.F.Morozov. Biopolymers, 30, 375 (1990).
4. A.V.Badasyan, A.V.Grigoryan, E.Sh.Mamasakhlishov, A.S.Benight, V.F.Morozov. J. Chem. Phys., 123, 194701 (2005).
5. V.F.Morozov, A.V.Badasyan, A.V.Grigoryan, M.A.Sahakyan, E.Sh.Mamasakhlishov. Mod. Phys. Let. B, 19, 79 (2005).
6. А.В.Бадасян, А.В.Григорян, А.Ю.Чухаджян, Е.Ш.Мамасакхлисов, В.Ф.Морозов. Изв. НАН Армении, Физика, 37, 320 (2002).
7. А.В.Бадасян, А.В.Григорян, Е.Ш.Мамасакхлисов, А.В.Царукян, В.Ф.Морозов. Изв. НАН Армении, Физика, 40, 148 (2005).
8. Ф.Р.Гантмахер. Теория матриц. М., Гостехиздат, 1953.
9. D.C.Poland, H.A.Sheraga. The Theory of Helix-Coil Transition. Acad. Press, New York, 1970.
10. R.M.Vartell, A.S.Benight. Phys. Rep., 126, 67 (1985).

ՊՈԼԻՊԵՊՏԻԴԱՅԻՆ ՇՐՔԱՅԻ ԸՆԴՀԱՆՐԱՅՐԱԾ ՄՈԴԵԼԸ
ՓՈԽԱԶԴԵՑՈՒԹՅԱՆ ԵՐԿՈՒ ՄԱՍՇՏԱԲՆԵՐՈՎ

Շ.Ա. ՏՈՆՈՅԱՆ, Տ.ՅՈՒ ԲՈՒՐՅԱԿԻՆԱ, Ա.Վ. ԾԱՌՈՒԿՅԱՆ,
Ե.Շ. ՄԱՄԱՍԱԽԼԻՍՈՎ, Վ.Ֆ. ՄՈՐՈԶՈՎ

Ավելի վաղ մեր կողմից մտցված պոլիպեպտիդային շղթայի ընդհանրացրած մոդելի հիման վրա, որը նկարագրում է պարույր-կծիկ անցումը ինչպես պոլիպեպտիդներում, այնպես էլ պոլինուկլեոտիդներում, առաջարկված է մոդել, որի համիլտոնիանը բաղկացած է փոխազդեցության տարբեր մասշտաբներով երկու համիլտոնիաններից: Տրանսֆեր-մատրիցային մոտեցման շրջանակներում հաշվված են պարուրայնության աստիճանը և կոռելյացիոն երկարությունը: Ցույց է տրված, որ փոխազդեցության երկու մասշտաբով մոդելը կարելի է բերել միամասշտաբ մոդելի:

GENERALIZED MODEL OF POLYPEPTIDE CHAIN
WITH TWO-SCALE INTERACTIONS

Sh.A. TONoyAN, T.Yu. BURYAKINA, A.V. TSARUKYAN,
Y.Sh. MAMASAKHLISOV, V.F. MOROZOV

Based on the earlier introduced Generalized Model of Polypeptide Chain (GMPC), which describes the helix-coil transition in both polypeptides and polynucleotides, the Hamiltonian consisting of two Hamiltonians with different scales of GMPC is proposed. In the framework of transfer-matrix approach the helicity degree and correlation length are calculated. It is shown that the model with two-scale interactions can be reduced to the one-scale model with a redefined parameter of the hydrogen-bond closure.