УДК 547.963.3

САМОСОГЛАСОВАННОЕ ОПИСАНИЕ АДСОРБЦИИ И ИЗМЕНЕНИЯ СТРУКТУРЫ АДСОРБЦИОННОГО ЦЕНТРА

В.Б. АРАКЕЛЯН^{1*}, С.В. АРУТЮНЯН², С.П. КОЧАРЯН²

¹Ереванский государственный университет, Ереван, Армения ²Ереванский государственный медицинский университет им. Мхитара Гераци, Ереван, Армения

*e-mail: v.arakelyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 5 июня 2019 г.)

В работе теоретически исследуется адсорбция лигандов на макромолекулы в случае, когда при связывании лиганда с макромолекулой изменяется структура адсорбционного центра. В этом случае кинетика адсорбции описывается системой из двух нелинейных дифференциальных уравнений. Такое рассмотрение приводит к тому, что адсорбционный центр приобретает такие свойства как множественность стационарных состояний (в том числе и бистабильное), триггерное и гистерезисное поведение. Показано, что учет деформации адсорбционного центра приводит к S-образной изотерме адсорбции.

1. Введение

Большинство биохимических процессов, происходящих в клетке, связаны с адсорбцией лигандов на макромолекулы. Практически во всех работах явление адсорбции рассматривают в приближении, когда адсорбируемый лиганд не влияет на структуру адсорбционного центра [1,2]. Однако, поскольку, как правило, адсорбционные центры и адсорбируемые лиганды имеют в своем составе дипольные или заряженные группы, то адсорбция лигандов на макромолекулы может привести к изменениям в структуре адсорбционного центра. Отметим, что лиганд деформирует профиль потенциала адсорбционного центра таким образом, что потенциальная яма несколько углубляется. При обратимой адсорбции в результате десорбции лиганда энергетический профиль адсорбционного центра релаксирует к своему первоначальному виду, который соответствует энергетическому профилю незанятого адсорбционного центра. Если время релаксации больше, чем среднее время между двумя последующими моментами поступления лигандов в адсорбционный центр, то изменения в структуре адсорбционного центра будут способствовать более эффективному связыванию лиганда с адсорбционным центром. Фактически эффективность связывания адсорбируемого лиганда в данный момент времени будет зависеть от среднего числа лигандов,

поступивших в потенциальную яму в предыдущие моменты времени. Как будет показано ниже, именно это обстоятельство индуцирует бистабильный режим адсорбции лигандов, что, в свою очередь, приводит к S-образной изотермы адсорбции.

2. Теоретическая часть

Адсорбцию и десорбцию лигандов на макромолекулы представим как квазихимическую реакцию связывания и распада лиганда с адсорбционным центром. Рассмотрим простейший случай, когда с одним адсорбционным центром связывается одна молекула лиганда. Квазихимическая реакция связывания молекулы лиганда L со свободным адсорбционным центром макромолекулы M записывается в виде [3]

$$L + M \underbrace{\underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\longleftrightarrow}}(LM)}, \qquad (1)$$

где (LM) – комплекс лиганда с адсорбционным центром, k_1 и k_{-1} – константы скоростей образования и распада комплекса (LM). По определению, константа равновесия для реакции (1) равна $K = k_1 / k_{-1}$. Можно показать, что учет изменения глубины потенциальной ямы адсорбционного центра на величину x (в единицах k_BT , где k_B – константа Больцмана, T – абсолютная температура) приводит к следующему соотношению между значениями констант с учетом изменения глубины потенциальной ямы K(x) и без учета изменения глубины потенциальной ямы K(x)

$$K(x) = K_0 \cdot \exp(x). \tag{2}$$

Подробный вывод (2) приведен в работе [4]. Из (2) видно, что константа равновесия K(x) экспоненциально зависит от x. Это приводит к тому, что небольшие изменения глубины потенциальной ямы адсорбционного центра x могут привести к значительным изменениям в значении константы равновесия. Однако, как было показано в [4], более важным является то, что поведение x является бифуркационным. Допустим, что на макромолекуле имеются N центров адсорбции. Число адсорбированных на макромолекуле лигандов равно n, их заполнение идет назависимо друг от друга. Легко показать, что в этих условиях изменение доли занятых адсорбционных центров r = n/N во времени описывается следующим дифференциальным уравнением

$$\frac{dr}{dt} = k_1 c_f (1 - r) - k_{-1} r , \qquad (3)$$

где c_f – число свободных лигандов в растворе. Принимая, что в начальный момент времени все адсорбционные центры свободны, имеем начальное условие в виде r(0) = 0. Если считать, что при адсорбции профиль потенциальной энергии не изменяется, то уравнение (3) легко решается и определяется кинетика заполнения адсорбционных центров на макромолекуле. Однако, если при адсорбции деформируется энергетический профиль потенциальной ямы, то следует согласованно описать процесс адсорбции и изменение глубины потенциальной ямы. В работе [5] приводится вывод релаксационного уравнения, описывающего изменение глубины потенциальной ямы x в виде

$$\tau \frac{dx}{dt} = -x + x_{\infty} w, \qquad (4)$$

где τ – время релаксации энергетического профиля адсорбционного центра к своему первоначальному виду, x_{∞} – предельная глубина потенциальной ямы, которая реализуется при бесконечно долгом пребывании лиганда в адсорбционной яме, w – вероятность заполнения потенциальной ямы, которая в рассматриваемых условиях независимого заполнения ям равна отношению n / N, т.е фактически w = r. В уравнении (4) первое слагаемое описывает влияние сил упругости на релаксацию энергетического профиля адсорбционного центра, а второе слагаемое описывает влияние заполнения ямы на релаксацию. Система нелинейных дифференциальных уравнений (3)–(4) описывает согласованный процесс адсорбции и изменение глубины потенциальной ямы [5]. Так как, как правило, в адсорбционных системах релаксация является медленным процессом, а адсорбция и десорбция – быстрым, то в силу адиабатического принципа исключения «быстрых» переменных решение уравнения (3) выбираем для квазистационарного режима

$$r = \frac{K(x)c_f}{1+K(x)c_f}.$$
(5)

Из (5) видно, что если при адсорбции не изменяется глубина потенциальной ямы адсорбционного центра, т.е. когда x = 0, то $K(x) = K_0$, и изотерма (5) переходит в классическую изотерму Лэнгмюра. Если же $x \neq 0$, то дальнейший анализ процесса адсорбции связан с исследованием свойств релаксационного уравнения, в правой части которого, как было указано выше, вместо w следует подставить значение r из (5). С учетом (2), имеем следующее релаксационное уравнение

$$\tau \frac{dx}{dt} = -x + \frac{x_{\infty}\gamma}{\exp(-x) + \gamma}, \qquad (6)$$
$$\gamma = K_0 c_f.$$

Анализ уравнения (6) проводим стандартным способом [6]. Вначале определяются стационарные решения (6), для этого правую часть уравнения (6) приравнивают нулю и из получившегося уравнения

$$x \cdot \exp(-x) = \gamma \cdot (x_{\infty} - x) \tag{7}$$

определяют x. Уравнение (7) удобно решить графически. Легко показать, что в зависимости от значения параметров γ и x_{∞} уравнение (7) имеет одно, два или три решения (рис. 1).



Рис.1. Графическое решение уравнения (7). По оси *Y* отложены значения функций, изображающие левую часть уравнения (7) (колоколообразная функция) и правую часть уравнения (7) (линейные функции). (а) – Пучок прямых, с вершиной в точке $x_{\infty} = 2$, построен согласно правой части уравнения (7) со значениями γ , равными 0.1, 0.2, 0.3, соответственно, снизу вверх. Отдельно прямая, проходящая через точку $x_{\infty} = 4$, является касательной к колоколообразной кривой со значением $\gamma \approx 0.135$. (b) – Пучок прямых с вершиной в точке $x_{\infty} = 6$, построен согласно правой части уравнения (7). Значения γ равны 0.02, 0.033, 0.06, 0.075, 0.09, соответственно, снизу вверх. Значение γ для нижней касательной $\gamma_1 \approx 0.033$ и верхней касательной $\gamma_1 \approx 0.075$ определены из численного решения уравнений (13) и (14).

Заметим, что правая часть уравнения (7) представляет собой пучок прямых с центром, который находится на оси x в точке $x = x_{\infty}$. Левая часть уравнения (7) представляет собой кривую с максимумом. Количество корней уравнения (7) зависит от числа пересечений прямой, изображающей правую часть уравнения (7) с кривой, изображающей левую часть уравнения (7). Для анализа возможных вариантов корней вначале получим условие, при котором прямая, изображающая правую часть уравнения (7), касается кривой

$$f(x) = x \cdot \exp(-x), \qquad (8)$$

которая описывает левую часть уравнения (7). Уравнение касательной в точке x_0 к функции f(x) записывается в виде

$$y(x) = f'(x_0)(x - x_0) + f(x_0), \qquad (9)$$

где $f'(x_0)$ производная функции f(x) в точке x_0 .

Уравнение касательной имеет вид

$$y(x) = x_0^2 \cdot \exp(-x_0) - (x_0 - 1) \cdot \exp(-x_0) \cdot x.$$
(10)

Уравнение прямой, изображающей правую часть уравнения (7), равно

$$y(x) = x_{\infty} \cdot \gamma - \gamma \cdot x . \tag{11}$$

Из условия согласованности уравнений (10) и (11) можно получить следующее уравнение

$$x_0^2 - x_\infty \cdot x_0 + x_\infty = 0, \qquad (12)$$

из которого определяется координата точки касания x_0 . Анализ уравнения (12) показывает, что в зависимости от предельной глубины потенциальной ямы x_{∞} следует различать три случая ($x_{\infty} < 4$, $x_{\infty} = 4$ и $x_{\infty} > 4$). В случае $x_{\infty} < 4$ уравнение (12) не имеет действительных корней, что говорит об отсутствии точки касания. В этом случае, очевидно, имеется только одна точка пересечения кривой, изображающей левую часть уравнения (7) и прямой, изображающей правую часть уравнения (7). При $x_{\infty} = 4$ уравнение (12) имеет одно решение, которое соответствует тому, что прямая касается кривой в точке перегиба. При $x_{\infty} > 4$ уравнение (12) имеет два разных решения, т.е. имеются две точки касания, абсциссы которых (x_0)₁ и (x_0)₂ равны:

$$(x_0)_{1,2} = \frac{x_\infty}{2} \pm \sqrt{\frac{{x_\infty}^2}{4}} - x_\infty .$$
 (13)

В точках касания параметр у принимает значения

$$\gamma_{1,2} = ((x_0)_{1,2} - 1) \cdot \exp(-(x_0)_{1,2}) . \tag{14}$$

В этих условиях, т.е. при $x_{\infty} > 4$, легко показать, что в области $\gamma < \gamma_1$ имеется только одно пересечение прямой (11) и кривой (8). По мере увеличения параметра γ и достижения им критического значения γ_1 , прямая вначале касается кривой (8), что свидетельствует о бифуркации, т.е. увеличении числа корней уравнения (7) до двух (первая бифуркация). Дальнейшее увеличение параметра γ приводит к тому, что уравнение (7) приобретает три решения. Продолжая увеличение параметра γ до следующего критического значения $\gamma = \gamma_2$ получим вначале уменьшение числа корней уравнения (7) до двух (вторая бифуркация). Дальнейшее увеличение γ выше γ_2 приведет вновь к одному решению уравнения (7). Все варианты решения уравнения (7) продемонстрированы на рис. 1а и рис. 1b. Характер решения уравнения (7) существенно изменяется при переходе через значение параметра $x_{\infty} = 4$. При построении кривых на рис. 1 взяты конкретные значения $x_{\infty} = 2$ и $x_{\infty} = 4$ на рис. 1а, и значение $x_{\infty} = 6$ на рис. 1b. Заметим, что для случая $x_{\infty} = 4$ из уравнения (14) легко определяется абсцисса точки касания (точка перегиба), которая равна $(x_0)_{1,2} = 2$. Далее из уравнения (14) определяем параметр $\gamma_{1,2} \approx 0.135$. При построении рис.1 учтено, что, поскольку x_{∞} – предельная безразмерная глубина потенциальной ямы, а у – безразмерная

концентрация лигандов в растворе, то эти параметры принимают положительные значения, причем γ может принять произвольное значение, а диапазон значений x_{∞} можно принять от 0 до примерно 10 (в силу обратимой физической адсорбции).

Отметим, что параметры x_{∞} и γ являются управляющими, поскольку фактически от них зависит число корней уравнения (7), т.е. число стационарных состояний системы. Важной задачей является выяснение того является ли данное стационарное состояние устойчивым или нет.

Вначале рассмотрим область тех значений x_{∞} , где реализуется мультистационарность. Из рис.1 видно, что это соответствует случаю $x_{\infty} > 4$, т.е. рис.1b, когда в зависимости от значения γ в системе может быть одно, два или три стационарных состояний. Проще всего выяснить стационарное состояние устойчиво или неустойчиво построим график правой части уравнения (6). Рис.2 построен для конкретного случая существования трех стационарных состояний x_1 , x_2 и x_3 , которые соответствуют трем пересечениям прямой, для которого $\gamma = 0.06$ с колоколообразной кривой на рис.1b.

Из рис.2 следует, что состояния x_1 и x_3 , в которых знак производной отрицателен, устойчивы, а состояние x_2 , в котором знак производной положителен, неустойчиво [8]. Чтобы определить устойчивость стационарных состояний в случае, когда при данном γ имеется два или одно стационарных состояний (рис.1b), нужно построить аналогичные рис.2 кривые для соответствующих значений γ . Из результатов такого анализа следует, что как при $\gamma < \gamma_1$ ($\gamma = 0.02$), так и при $\gamma > \gamma_2$ ($\gamma = 0.09$) имеется одно стационарное состояние и оно устойчиво. Для каждого из критических состояний, когда $\gamma = \gamma_1$ и $\gamma = \gamma_2$ (рис.1b) имеются два стационарных состояния – одно из которых устойчиво, а другое неустойчиво.



Рис.2. График правой части уравнения (6) при $x_{\infty} = 6$ и $\gamma = 0.06$.

Для понимания бифуркационной природы стационарных состояний рассматриваемой системы следует изучить зависимость $x(\gamma)$. Ее в неявном виде показывает уравнение (7), она представлена на рис.3. Из рис.3 видно, что при увеличении управляющего параметра γ от нуля до бифуркационного значения $\gamma = \gamma_2$ (вдоль кривой устойчивых состояний AB) система покидает неустойчивую точку B и скачком переходит на верхнюю ветвь устойчивых состояний DC. При дальнейшем увеличении γ система будет находиться в устойчивом (и при том единственном) состоянии равновесия. Если уменьшать значения γ (по кривой устойчивых состояний DC), то при достижении бифуркационного значения γ_1 система скачком покинет неустойчивую точку C и перейдет на нижнюю ветвь устойчивых состояний AB, образовав таким образом замкнутый цикл устойчивых стационарных состояний и реализовав тем самым явление гистерезиса.

Отметим также, что рассматриваемая система обладает триггерными свойствами, поскольку при значениях управляющего параметра γ в интервале между γ_1 и γ_2 система находится в бистабильном состоянии и может функционировать в одном из двух устойчивых состояний.



Рис.3. Кривая стационарных состояний в зависимости от параметра γ (при $x_{\infty} = 6$).

Анализ на устойчивость стационарных состояний для случая, представленного на рис.1а, проводится аналогичным способом. Соответствующие построения показывают, что стационарные состояния устойчивы. Конкретный пример такого построения представлен на рис.4, которое соответствует одному пересечению прямой, для которого $\gamma = 0.2$ с колоколообразной кривой на рис.1а.

Из рис.4 следует, что имеется одно стационарное состояние – x_1 и оно устойчиво, поскольку знак производной отрицателен.

Таким образом, во всем диапазоне изменения параметра $\gamma = K_0 c_f$ в системе всегда имеется хотя бы одно устойчивое стационарное состояние.



Рис.4. График правой части уравнения (6) при $x_{\infty} = 2$ и $\gamma = 0.2$.

Для определения изотермы адсорбции вначале необходимо найти плотность стационарного распределения конформационной переменной, учитывающего ее флуктуации относительно стационарных значений. Для этой цели необходимо вычислить эффективный конформационный потенциал системы [7] $U_{\rm eff}(x, \gamma, x_{\infty})$. Перепишем уравнение (6) в виде

$$\tau \frac{dx}{dt} = -\frac{\partial U_{\text{eff}}(x, \gamma, x_{\infty})}{\partial x}$$
(15)

и далее, как легко убедиться, проинтегрировав правую часть уравнения (15), получим следующее выражение эффективного конформационного потенциала

$$U_{\rm eff}(x,\gamma,x_{\infty}) = \frac{x^2}{2} - x_{\infty}(x + \ln|\gamma + \exp(-x)|).$$
 (16)

Использовав (16), найдем плотность равновесного распределения конформационной переменной по стандартной формуле:

$$P(x,\gamma,x_{\infty}) = Z^{-1} \exp(-U_{eff}(x,\gamma,x_{\infty})),$$

$$Z = \int_{0}^{x_{\infty}} \exp(-U_{eff}(x,\gamma,x_{\infty})) dx.$$
(17)

Представляет интерес исследование характерных свойств плотности равновесного распределения конформационной переменной (17) в зависимости от числа ее стационарных состояний. Рассмотрим случай, когда при произвольном значении γ конформационная переменная имеет одно стационарное состояние и оно устойчиво. Соответствующие состояния реализуются при $x_{\infty} < 4$ и показаны на рис.1а. На рис.5 представлена плотность равновесного распределения конформационной переменной для этого случая при $\gamma = 0.2$.

Из рис.5 следует, что кривая плотности вероятности равновесного распределения конформационной переменной имеет один максимум, что, как это видно из рис.4, согласуется с наличием устойчивого стационарного состояния. Можно



Рис.5. Плотность равновесного распределения конформационной переменной $P(x, \gamma, x_{\infty})$ при $x_{\infty} = 2$ и $\gamma = 0.2$.

показать, что координата абсциссы точки максимума кривой на рис.5 совпадает с координатой точки минимума конформационного потенциала (16).

Далее рассмотрим случай, когда $x_{\infty} > 4$. В этом случае, как было показано выше, в зависимости от значения γ имеем одно, два или три стационарные состояния. Построим плотность равновесного распределения конформационной переменной для трех характерных областей изменения γ . Это области $\gamma < \gamma_1$ и $\gamma > \gamma_2$, где имеется одно стационарное состояние и оно устойчиво, и область $\gamma_1 < \gamma < \gamma_2$, где имеются три стационарных состояния, одно из которых неустойчиво, а два других состояний устойчивы (рис.3). На рис.6а и рис.6b представлены плотности равновесного распределения конформационной переменной.



Рис.6. Плотность равновесного распределения конформационной переменной $P(x, \gamma, x_{\infty})$ при $x_{\infty} = 6$. (a) – $\gamma = 0.025$ (сплошная линия), $\gamma = 0.085$ (пунктирная линия). (b) – $\gamma = 0.0454$.

Из рис.6 видно, что, как и следовало ожидать, в областях, где реализуются случаи моностабильного состояния, кривая плотности равновесного распределения конформационной переменной имеет один максимум (рис.6а), а в области, где реализуется бистабильность, плотность равновесного распределения

конформационной переменной имеет два максимума, разделенные минимумом (рис.6b).

Использовав распределение конформационной переменной (17) и усреднив число адсорбировавшихся лигандов (5) по всем конфигурациям конформационной переменной, получим следующее окончательное выражение для изотермы адсорбции:

$$\theta(\gamma, x_{\infty}) = \int_{0}^{x_{\infty}} r(x, \gamma, x_{\infty}) \cdot P(x, \gamma, x_{\infty}) dx,$$

$$0 \le \theta(\gamma, x_{\infty}) \le 1.$$
(18)

Изотерма адсорбции (18) показывает, что при различных значениях параметра x_{∞} изотерма имеет качественно различный вид – вид изотермы существенно зависит от параметра x_{∞} , с увеличением параметра x_{∞} и при переходе через точку $x_{\infty} = 4$ качественно меняется вид кривой. При $x_{\infty} < 4$ изотерма имеет классический ленгмюровский вид [4], а при $x_{\infty} > 4$ изотерма явно имеет S-образный вид (рис.7). В литературе описан ряд причин, приводящих к S-образной кривой адсорбции [1,2,8]. Обычно для получения кооперативной изотермы адсорбции вводят непосредственное взаимодействие между адсорбированными лигандами [9].



Рис.7. Изотерма адсорбции $\theta(\gamma, x_{\infty})$ при значении параметра $x_{\infty} = 6$. Параметр γ связан с концентрацией лигандов в растворе c_f соотношением $\gamma = c_f K_0$.

3. Заключение

Результатом этой работы является то, что в зависимости от параметров x_{∞} и γ в системе реализуются устойчивые и неустойчивые состояния конформационной переменной, причем в области физически допустимых значений x_{∞} и γ , всегда имеется хотя бы одно устойчивое состояние. Важно также отметить, что при некоторых значениях параметров x_{∞} и γ система может

функционировать в бистабильном режиме. Это обстоятельство приводит к интересным и важным последствиям – адсорбционный центр приобретает триггерные свойства.

Важно отметить, что качественно различные изотермы адсорбции получаются в результате учета деформации потенциальной ямы адсорбционного центра в процессе адсорбции. В случае, когда $P(x, \gamma, x_{\infty})$ имеет один максимум, усредненная изотерма адсорбции имеет классический ленгмюровский вид, если же функция $P(x, \gamma, x_{\infty})$ имеет два максимума, то изотерма адсорбции имеет Sобразной вид, характерный для кооперативной адсорбции. Механизм возникновения S-образной изотермы адсорбции в нашем случае связан с взаимодействием лиганда с атомарными группами вблизи адсорбционного центра. Очевидно, что если среднее расстояние между адсорбированными лигандами достаточно велико, то прямое взаимодействие между адсорбированными лигандами является слабым, и вероятность реализации кооперативного режима адсорбции мала. В предлагаемом в этой работе механизме эффект возникновения кооперативного режима адсорбции не зависит от среднего расстояния между адсорбированными лигандами. Это обстоятельство может служить основой для идентификации механизма кооперативного связывания лигандов с адсорбционным центром.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Ю.Д. Нечипуренко. Актуальные вопросы биологической физики и химии, 1, 204, (2016).
- V.A. Bloomfield, D.M. Crothers, I. Tinoco. Nucleic acids: structures, properties and functions, University Science Books, Sausalito, CA. 2000.
- 3. V.B. Arakelyan, S.V. Harutyunyan, V. Andriasyan, H.V. Arakelyan. J. Biomol. Struct. Dyn., 30, 217, (2012).
- 4. V.B. Arakelyan, S.G. Haroutiunian, G.A. Abgaryan, H.V. Arakelyan, T.S. Haroutunyan, J. Biomol. Struct. Dyn., 22, 245, (2004).
- 5. Ю.Б. Гайдидей, И.С. Магура, Н.В. Пивоварова, В.Н. Харкянен, В.А. Чинаров, Биол. мембраны, 8, 648, (1991).
- 6. А.С. Братусь, А.С. Новожилов, А. П. Платонов. Динамические системы и модели биологии, Физматлит, 2010.
- 7. V.N. Kharkyanen, S.O. Yesylevskyy, N.M. Berezetskaya, C. Boiteux, Ch. Ramseyer. Biopolymers and Cell., 25, 476, (2009).
- Y.D. Nechipurenko, A.L. Mikheikin, S.A. Streltsov, A. S. Zasedatelev, I. R. Nabiev, J. Biomol. Struct. Dyn., 18, 703, (2001).
- 9. Ю.Д. Нечипуренко, Анализ связывания биологически активных соединений с нуклеиновыми кислотами., Ижевск ИКИ, Москва, 2015.

ՆՍՏԵՑՄԱՆ ԵՎ ՆՍՏԵՑՄԱՆ ԿԵՆՏՐՈՆԻ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔԻ ՓՈՓՈԽՈՒԹՅԱՆ ԻՆՔՆԱՀԱՄԱՁԱՅՆԵՑՎԱԾ ՆԿԱՐԱԳՐՈՒԹՅՈՒՆԸ

Վ.Բ. ԱՌԱՔԵԼՅԱՆ, Ս.Վ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Ս.Պ. ՔՈՉԱՐՅԱՆ

Աշխատանքում տեսականորեն ուսումնասիրվել է մակրոմոլեկուլների վրա լիգանդների նստեցման երևույթն այն դեպքում, երբ այդ նստեցումը փոխում է նստեցման կենտրոնի կառուցվածքը։ Այդ դեպքում նստեցման կինետիկան նկարագրվում է երկու ոչ գծային դիֆերենցիալ հավասարումների միջոցով։ Այս մոտեցումը հանգեցնում է նրան, որ նստեցման կենտրոնը ձեռք է բերում այնպիսի հատկություններ, ինչպիսիք են ստացիոնար վիճակների բազմազանությունը (այդ թվում երկստաբիլ վիճակների առկայությունը), տրիգերային եւ հիստերեզի վարքագծերը։ Ցույց է տրվել, որ նստեցման կենտրոնի դեֆորմացիան հանգեցնում է Տ-աձև նստեցման իզոթերմի։

SELF-CONSISTENT DESCRIPTION OF ADSORPTION AND CHANGES IN THE ADSORPTION CENTER STRUCTURE

V.B. ARAKELYAN, S.V. HARUTYUNYAN, S.P. KOCHARYAN

In the paper, the adsorption of ligands to macromolecules is theoretically investigated in the case when the structure of the adsorption center changes when a ligand is bound to the macromolecule. In such a case, the adsorption kinetics is described by a set of two nonlinear differential equations. This consideration leads to the fact that the adsorption center acquires such properties as the multiplicity of stationary states (including bistable states), trigger and hysteresis behavior. It is shown that taking into account the deformation of the adsorption center leads to an S-shaped adsorption isotherm.