

УДК 541.64

ПЕРЕХОД СПИРАЛЬ-КЛУБОК ПРИ НАЛИЧИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ ДВУМЯ ЦЕПЯМИ

А.В. ЦАРУКЯН¹, Ш.А. ТОНОЯН¹, Г.Н. АЙРАПЕТЯН¹,
И.В. БАГДЯН², Е.Ш. МАМАСАХЛИСОВ¹, В.Ф. МОРОЗОВ¹

¹Ереванский государственный университет, Армения

²Ереванский государственный медицинский университет, Армения

(Поступила в редакцию 30 апреля 2008 г.)

На основе ранее введенной обобщенной модели полипептидной цепи (ОМПЦ) рассмотрен переход спираль-клубок в двух цепях, взаимодействующих между собой бок о бок, причем существует четыре типа взаимодействия (hh, hc, ch, cc). Гамильтониан системы включает в себя сумму базовых гамильтонианов ОМПЦ отдельных цепей и член, отвечающий за взаимодействие. Показано, что преобладание энергии однотипного взаимодействия (hh, cc) над смешанным (hc, ch) приводит к резкому возрастанию корреляционной длины и сужению интервала плавления системы. Нетривиальное поведение системы наблюдается в альтернативном случае преобладания энергии смешанного взаимодействия (hc, ch) над однотипным (hh, cc). В этом случае также наблюдается рост корреляционной длины, а кривая денатурации имеет двухступенчатый характер. Доля стыков и средняя длина спирального участка показывают, что имеет место слияние и распад спиральных участков.

1. Введение

Широко известно, что биополимеры *in vivo* компактизованы в структуры различной природы. Так, двухспиральная ДНК в структуре хромосомы намотана на гистон с вполне определенным радиусом, что приводит к сближению цепей и их взаимодействию. ДНК в бактериофагах и вирусах упакована в капсид, размеры которого сравнимы с длиной жесткости ДНК, что опять-таки является причиной взаимодействия спиралей. Природные белки находятся в глобулярном состоянии, возникающем из-за отталкивания между гидрофобными повторяющимися единицами и водой, что также приводит к межспиральным взаимодействиям. Некоторые сократительные белки состоят из параллельно упакованных спирализованных цепей.

Таким образом, возникает необходимость описывать влияние взаимодействия между цепями на переход спираль-клубок. Эти взаимодействия накладывают дополнительные ограничения на конформационные переходы в соседних цепях, активируя или подавляя эти переходы. Такие исследования были проведены в [1-4].

Ранее нами было исследовано совместное влияние на переход спираль-

клубок в ДНК взаимодействия различных масштабов в рамках одной цепи [5]. В данной статье исследуется переход спираль-клубок в рамках обобщенной модели полипептидной цепи с межцепочечными взаимодействиями.

2. Базовая модель (ОМПЦ)

Ранее нами была предложена микроскопическая теория перехода спираль-клубок, применимая как для полипептидов, так и для ДНК, называемая обобщенной моделью полипептидной цепи [5-12]. Поскольку дальнейшие исследования будут проводиться на ее основе, приведем ее основные положения как базовой модели.

Гамильтониан ОМПЦ имеет вид

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

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). Значение $\gamma_i = 1$ означает, что повторяющаяся единица находится в спиральном состоянии, а 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:

$$G = \begin{pmatrix} e^J & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & Q-1 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & Q-1 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где элемент (1,1) равен e^J , 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 модели имеет следующий вид [13]:

$$Z = \text{Tr} G^N = \text{Tr} A \Lambda^N B = \sum_{k=1}^{\Delta} \lambda_k^N, \quad (3)$$

где использованы левые A и правые B собственные векторы трансфер-матрицы G , а $\{\lambda_k\}$ – собственные значения матрицы G , которые определяются характеристическим уравнением

$$\lambda^{A-1}(\lambda - e')(\lambda - Q) = (e' - 1)(Q - 1). \quad (4)$$

Учитывая теорему Фробениуса–Перрона [14], в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) статсумма может быть представлена как

$$Z = \lambda_1^N,$$

где λ_1 – главное собственное значение матрицы G .

На основе трансфер-матричного представления ОМППЦ были вычислены следующие усредненные характеристики модели, которые могут быть либо измерены экспериментально, либо помогают осмыслению деталей перехода спираль–клубок [5-12]: 1) степень спиральности, средняя доля повторяющихся единиц, связанных водородными связями; 2) двухчастичный пространственный коррелятор, который описывает взаимозависимость образования водородных связей в точках i и $i+r$; 3) корреляционная длина, которая соответствует масштабу затухания корреляций вдоль цепи при больших r ; 4) средняя доля стыков между спиральными и клубкообразными участками цепи; 5) средняя длина спирального участка.

3. Взаимодействие двух цепей ОМППЦ

Рассмотрим две цепи, описываемые ОМППЦ, которые взаимодействуют между собой так, что взаимодействуют повторяющиеся единицы с одинаковым номером, причем взаимодействие зависит от состояния повторяющейся единицы так, что энергия взаимодействия зависит от того, связана ли повторяющаяся единица водородной связью (h) или нет (c). Таким образом, имеется четыре типа взаимодействия (hh , hc , ch , cc), в связи с чем гамильтониан системы может быть записан в виде

$$\begin{aligned} -\beta H = & J_0 \sum_{i=1}^N \delta_i^{(A)} + J_0 \sum_{j=1}^N \delta_j^{(A)} + I_{hh} \sum_{i,j=1}^N \delta_i^{(A)} \delta_j^{(A)} + I_{hc} \sum_{i,j=1}^N \delta_i^{(A)} (1 - \delta_j^{(A)}) + \\ & + I_{ch} \sum_{i,j=1}^N (1 - \delta_i^{(A)}) \delta_j^{(A)} + I_{cc} \sum_{i,j=1}^N (1 - \delta_i^{(A)}) (1 - \delta_j^{(A)}). \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь первые два члена определяют гамильтониан ОМППЦ для каждой из цепей. Следующие 4 члена определяют взаимодействие между цепями: первый – для взаимодействия между двумя спиральными состояниями (hh), следующий – для взаимодействия спирального и клубкообразного состояний цепей (hc) и т.д.

Раскрывая скобки и приведя подобные члены, получаем с точностью до константы

$$-\beta H = (J_0 + I_{hc} - I_{cc}) \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta)} + (J_0 + I_{ch} - I_{cc}) \sum_{j=1}^N \delta_j^{(\Delta)} + (I_{hh} + I_{cc} - I_{hc} - I_{ch}) \sum_{i,j=1}^N \delta_i^{(\Delta)} \delta_j^{(\Delta)}. \quad (6)$$

Таким образом, с учетом идентичности обеих цепей ($I_{hc} = I_{ch}$) и после обозначений $J = (J_0 + I_{hc} - I_{cc}) = (J_0 + I_{ch} - I_{cc})$, $I = I_{hh} + I_{cc} - I_{hc} - I_{ch} - I_{cc}$, гамильтониан запишется в виде

$$-\beta H = J \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta)} + J \sum_{j=1}^N \delta_j^{(\Delta)} + I \sum_{i,j=1}^N \delta_i^{(\Delta)} \delta_j^{(\Delta)}. \quad (7)$$

При различном соотношении параметров исходного гамильтониана (5), приведенные параметры гамильтониана (7) могут принимать следующие значения.

1. $J > 0$, $I > 0$. Этот случай эффективно стабильной спиральной структуры и эффективного межцепочечного притяжения соответствует высокой стабильности спиральной структуры (большое J_0) и превосходству однотипных взаимодействий (hh и cc) над разнотипными (hc и ch).

2. $J > 0$, $I < 0$. Этот случай эффективно стабильной спиральной структуры и эффективного межцепочечного отталкивания соответствует наибольшей эффективности межцепочечного смешанного взаимодействия (большие значения I_{hc} и I_{ch}).

3. $J < 0$, $I > 0$. Этот случай эффективно нестабильной спиральной структуры и эффективного межцепочечного притяжения соответствует отрицательным J_0 и наибольшей эффективности межцепочечного однотипного взаимодействия (большие значения I_{hc} и I_{ch}).

Мы будем исходить из положительности выражения полной энергии гамильтониана, т.е. $2J + I > 0$, из чего следует $2J_0 + I_{hh} - I_{cc} > 0$. Поэтому случай $J < 0$, $I < 0$ рассматриваться не будет.

В случае $I = 0$ трансфер-матрица M для гамильтониана (7) сводится к прямому произведению трансфер-матриц G , соответствующих гамильтонианам (1) для двух цепей, т.е.

$$M = G \otimes G. \quad (8)$$

Матрица M имеет порядок $\Delta^2 \times \Delta^2$, причем только элемент M_{11} содержит член e^{2J} , отражающий суммарную энергию обеих цепей, остальные элементы либо содержат энергии одной цепи, либо не содержат энергии вовсе. Проиллюстрируем это для случая $\Delta = 2$. Трансфер-матрица для базового гамильтониана имеет вид

$$G = \begin{pmatrix} e^J & Q-1 \\ 1 & Q-1 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Для прямого произведения трансфер-матрицы базовой модели (9) самой на себя получается следующий результат, соответствующий $I = 0$:

$$M(I=0) = \begin{pmatrix} e^{2J} & e^J(Q-1) & e^J(Q-1) & (Q-1)^2 \\ e^J & e^J(Q-1) & Q-1 & (Q-1)^2 \\ e^J & Q-1 & e^J(Q-1) & (Q-1)^2 \\ 1 & Q-1 & Q-1 & (Q-1)^2 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Для случая отличной от нуля энергии мецепочечного взаимодействия I эту энергию может содержать только член M_{11} и результат переписывается как

$$M = \begin{pmatrix} e^{2J+I} & e^J(Q-1) & e^J(Q-1) & (Q-1)^2 \\ e^J & e^J(Q-1) & Q-1 & (Q-1)^2 \\ e^J & Q-1 & e^J(Q-1) & (Q-1)^2 \\ 1 & Q-1 & Q-1 & (Q-1)^2 \end{pmatrix}. \quad (10a)$$

Таким образом, для гамильтониана (7) трансфер-матрица может быть представлена в виде

$$M = G \otimes G + e^{2J}(e^I - 1)P, \quad (11)$$

где P — матрица порядка $\Delta^2 \times \Delta^2$, в которой $P_{11} = 1$, а остальные элементы равны нулю. Таким образом, аналогично базовому гамильтониану, статсумма будет определяться выражением (3):

$$Z = \text{Tr} M^N. \quad (12)$$

И в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) получаем $Z = \lambda_1^N$, где λ_1 — главное собственное число матрицы M .

Следует отметить, что вековое уравнение для матрицы M не столь компактно, как в (4) для матрицы G .

4. Вычисляемые параметры

4.1. Степень спиральности θ

Исходя из гамильтониана (7), как и в случае базовой модели, степень спиральности определяется следующим выражением:

$$\theta = \langle \delta_i^A \rangle = \frac{1}{2NZ} \frac{\partial Z}{\partial J}, \quad (13)$$

где в качестве трансфер-матрицы используется матрица (10), соответствующая гамильтониану (7), а в качестве степени полимеризации фигурирует общая длина двух цепей $2N$.

В термодинамическом пределе получаем

$$\theta = \frac{1}{2} \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial J} = \frac{1}{2\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial J}. \quad (14)$$

Поскольку статсумма определяется выражением (12), то для степени спиральности имеем

$$\theta = \frac{\text{Tr} M' M^{N-1}}{2Z}, \quad (15)$$

где $M' = \partial M / \partial J$.

Учитывая (11), получаем

$$M' = G' \otimes (G + (e' - 1)G') + (G + (e' - 1)G') \otimes G'. \quad (16)$$

Из (15), введя правые B и левые A собственные матрицы для матрицы M , получаем в термодинамическом пределе

$$\theta = \frac{\text{Tr} M' A A^{N-1} B}{2\lambda_1^N} = \frac{(BM'A)_{11}}{2\lambda_1}. \quad (17)$$

4.2. Двухчастичная корреляционная функция $g(r)$ и корреляционная длина ξ

Так как мы следуем стандартной процедуре построения и анализа статистико-механической модели, то имеем возможность и право использовать анализ корреляционных функций нашей модели при исследовании перехода спираль-клубок. В частности, двухчастичный пространственный коррелятор в нашем случае описывает взаимозависимость образования водородных связей i -ой и $(i+r)$ -ой повторяющихся единиц.

Используя выражения для статистической суммы в виде (12) и определение степени спиральности в виде (14), можно записать двухчастичный коррелятор как

$$g(r) = \langle \delta_i^A \delta_{i+r}^A \rangle - \langle \delta_i^A \rangle \langle \delta_{i+r}^A \rangle = \frac{\text{Tr} M' M^{r-1} M' M^{N-r-1}}{2Z} - \theta^2. \quad (18)$$

Введя, как и для степени спиральности правые B и левые A собственные матрицы для матрицы M , получаем в термодинамическом пределе

$$g(r) = \sum_{k=2}^A \frac{(BM'A)_{1k}}{\lambda_1} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_1} \right)^{r-1} \frac{(BM'A)_{k1}}{\lambda_1}. \quad (19)$$

При достаточно больших r в выражении (19) останется лишь член с λ_2 - вторым по величине собственным значением матрицы M :

$$g(r) = \frac{(BM'A)_{12}}{\lambda_1} \frac{(BM'A)_{21}}{\lambda_1} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{r-1} = \text{const} \cdot \exp \left(-\frac{r}{\xi} \right). \quad (20)$$

Подобное асимптотическое поведение двухчастичной корреляционной функции при больших r характерно для одномерных систем [15] и может быть описано как экспоненциальный спад на масштабе корреляционной длины

$$\xi = \ln^{-1} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right). \quad (21)$$

Так как мы ставим задачу исследования перехода, а не построение кривых плавления, то удобнее анализировать корреляционную длину вместо кривой плавления. Отметим, что расчет корреляционной длины из (21) является несравненно более легкой задачей по сравнению с расчетом дифференциальной кривой плавления и является величиной, имеющей ясный физический смысл. Значение корреляционной длины в максимуме несет информацию о кооперативности перехода, а температура в этой точке — о стабильности.

4.3. Доля стыков η

Этот параметр показывает долю тех участков, где за повторяющейся единицей, находящейся в спиральном состоянии, следует повторяющаяся единица, находящаяся в клубкообразном состоянии, т.е. показывает долю спиральных участков. В рамках нашей модели этот параметр η должен быть определен следующим образом:

$$\eta = \langle \delta_i^{(A)} (1 - \delta_{i+1}^{(A)}) \rangle = \langle \delta_i^{(A)} \rangle - \langle \delta_i^{(A)} \delta_{i+1}^{(A)} \rangle = \theta - \frac{\text{Tr}(BM'M'A)\Lambda^{N-2}}{2\lambda_1^N} = \theta - \frac{(BM'M'A)_{11}}{2\lambda_1^2}. \quad (22)$$

4.4. Средние длины спиральных v_h и клубкообразных v_c участков

Если общее число повторяющихся единиц в спиральном состоянии равно $N\theta$, а в клубкообразном — $N(1-\theta)$, то среднее число повторяющихся единиц, находящихся в спиральном участке, равно общему числу повторяющихся единиц, находящихся в спиральном участке, деленное на число таких участков, т.е. на число стыков, которое равно $N\eta$:

$$v_h = \frac{\theta}{\eta}. \quad (23)$$

Аналогичным способом можно определить и среднюю длину клубкообразного участка:

$$v_c = \frac{1-\theta}{\eta}. \quad (24)$$

5. Результаты и обсуждение

Рассмотрим гамильтониан (7). Для его анализа приведем параметры к полной энергии $2J+I$ и введем параметр α , определяющий долю вклада межцепочечных взаимодействий в полную энергию всех взаимодействий в гамильтониане, т.е. $\alpha = I/(2J+I)$. Тогда $(1-\alpha)/2 = J/(2J+I)$ и гамильтониан может быть преобразован к виду

$$-\beta H = (2J + I) \left(\left(\frac{1-\alpha}{2} \right) \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta)} + \left(\frac{1-\alpha}{2} \right) \sum_{j=1}^N \delta_j^{(\Delta)} + \alpha \sum_{i,j=1}^N \delta_i^{(\Delta)} \delta_j^{(\Delta)} \right). \quad (25)$$

Для более тщательного исследования перехода спираль-клубок введем следующую параметризацию. Пусть $(2J + I)/\ln Q = 1/t$. Таким образом мы вводим безразмерную температуру, причем она определяется так, чтобы точка перехода T_m была бы вблизи $t = 1$. Как было показано ранее для других задач [5-12], точка перехода T_m определяется полной энергией гамильтониана U как

$$e^{\frac{U}{T_m}} = Q. \quad (26)$$

5.1. Случай $1 > \alpha > 0$

Этот случай соответствует стабилизации спиральной структуры вдоль цепи $J > 0$ и эффективному притяжению между цепями $I > 0$.

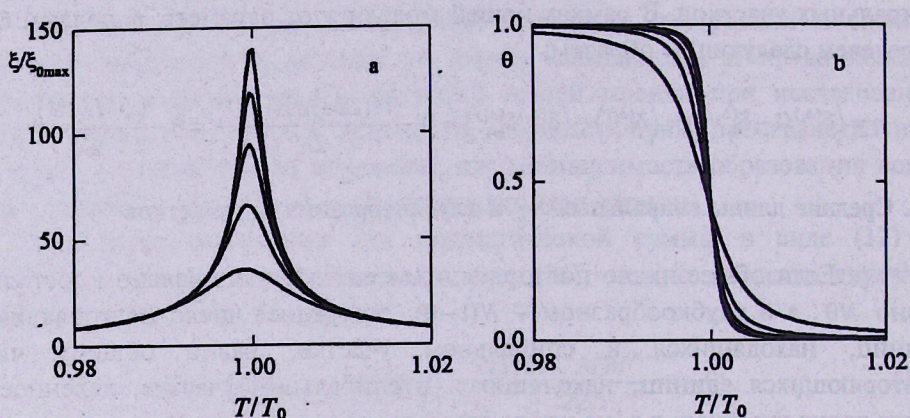


Рис.1. а) Зависимость корреляционной длины от температуры для значений параметров $\Delta = 3$; $Q = 20$; $\alpha \in [0.1; 0.5]$. Данные представлены в приведенных единицах $\xi/\xi_{0\max}$ и T/T_0 . б) Зависимость степени спиральности от температуры для того же набора параметров и в тех же единицах.

Как показывают расчеты, графики температурной зависимости корреляционной длины ξ (рис.1а) так же, как и в случае базовой модели, являются кривыми с максимумами и с увеличением вклада межцепочечных взаимодействий в общую энергию системы растет пик корреляционной длины. Соответственно, на графиках, описывающих поведение степени спиральности θ (рис.1б), переход происходит с все меньшим интервалом плавления. Следует отметить, что температурное положение максимума для ξ и точки перехода для θ не зависит от α . Таким образом, точка перехода для данного случая определяется соотношением (26). Как показывают расчеты, это соотношение тем вернее, чем больше величина Q .

5.2. Случай $\alpha < 0$.

Этот случай соответствует стабилизации спиральной структуры вдоль цепи $J > 0$ и эффективному отталкиванию между цепями $I < 0$.

Как показывают расчеты, графики температурной зависимости корреляционной длины ξ так же, как и в случае базовой модели, являются кривыми с максимумами и с увеличением вклада межцепочечных отталкиваний в общую энергию системы, т.е. с уменьшением α , растет пик корреляционной длины. Однако, в отличие от случая $1 > \alpha > 0$, кривые обнаруживают наряду с ростом пика также и значительное уширение, как это показано на рис.2а. Таким образом, при наличии межцепочечного отталкивания изменение корреляционной длины происходит в более широком температурном интервале, чем в случае притяжения. Еще более яркие отличия показывает поведение степени спиральности. Как показано на рис.2б, с увеличением вклада межцепочечных отталкиваний в общую энергию системы, т.е. с уменьшением α кривые денатурации становятся двухступенчатыми, причем ширина ступеньки растет с уменьшением α . Такое поведение степени спиральности θ объясняется дестабилизацией контактов hh по сравнению с hc ; таким образом, система начинает плавиться при более низкой температуре до тех пор, когда напротив спирального состояния будет всегда клубкообразное, а это соответствует $\theta = 1/2$. Дальнейшее плавление приводит к увеличению числа контактов cc по отношению к hc , что, естественно, происходит при большей температуре. Сопоставление температурного поведения ξ и θ показывает, что в температурном интервале, где $\theta = 1/2$, наблюдается значительный рост корреляционной длины. Для выяснения того, какие процессы приводят к корреляциям при постоянной степени спиральности были вычислены средние доли стыков η (рис.3а) и средние длины спиральных участков v_h (рис.3б).

Из рисунков видно, что поведение η является двухэтапным и каждый этап подобен базовой модели. Пики поведения η соответствуют полупереходу на графике поведения θ , а в точке перехода базовой модели η проходит через минимум. Именно это наличие минимума приводит к такому поведению средней длины спирального участка, как изображено на рис.3б. На первом этапе плавления наблюдается быстрый спад v_h , как и в базовой модели, но при более низкой температуре. В дальнейшем, на протяжении температурного интервала, когда $\theta = 1/2$, наблюдается колоколообразное изменение v_h , после чего продолжается спад, как и в базовой модели.

Таким образом, при $\alpha < 0$ однородная система плавится в два этапа, причем постоянному значению степени спиральности $\theta = 1/2$ сопутствуют большие корреляции, связанные со слиянием и распадом спиральных участков.

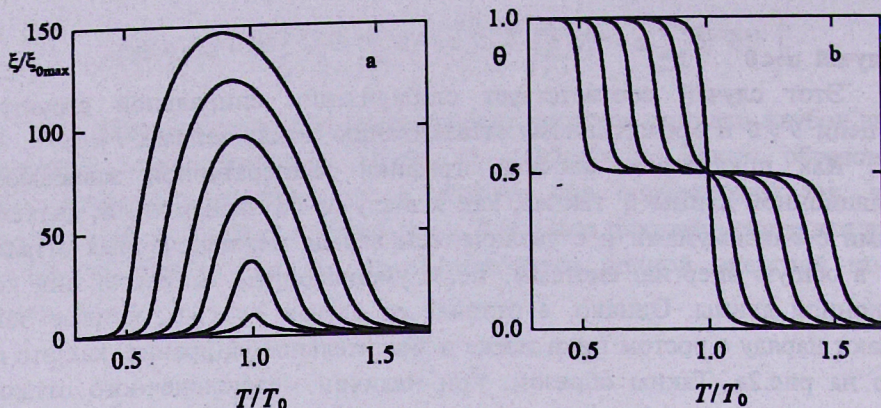


Рис.2. а) Зависимость корреляционной длины от температуры для значений параметров $\Delta=3$; $Q=20$; $\alpha \in [-0.5; 0]$. Данные представлены в приведенных единицах $\xi/\xi_{0\max}$ и T/T_0 . б) Зависимость степени спиральности от температуры для того же набора параметров и в тех же единицах.

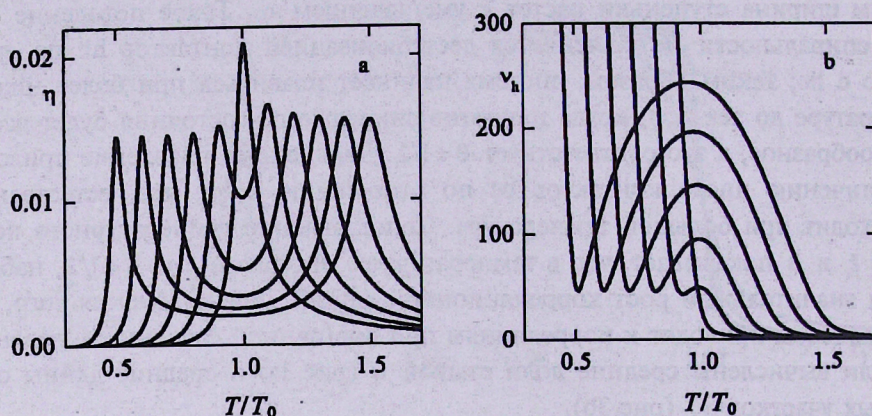


Рис.3. а) Зависимость доли стыков от приведенной температуры для значений параметров $\Delta=3$; $Q=20$; $\alpha \in [-0.5; 0]$. б) Зависимость средней длины спирального участка от приведенной температуры для того же набора параметров.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Skolnick, A. Holtzer. *Macromolecules*, 15, 303 (1982).
2. А.С. Костюкова. *Усп. биол. химии*, 42, 217 (2002).
3. L.S. Tobacman. *Ann.Rev.Physiol.*, 58, 447 (1996).
4. E. Kremneva, R. Maytum, O. Nikolaeva, D. Levitsky, M. Geeves. *J. Muscle Res. and Cell Motil.*, 25, 259 (2004).
5. Ш.А. Тоноян, Т.Ю. Бурякина, А.В. Царукян, Е.Ш. Мамасакхлисов, В.Ф. Морозов. *Изв. НАН Армении, Физика*, 42, 466 (2007).
6. N.S. Ananikyan, Sh.A. Hairyan, E.Sh. Mamasakhlisov, V.F. Morozov. *Biopolymers*, 30, 375 (1990).
7. Sh.A. Hairyan, E.Sh. Mamasakhlisov, V.F. Morozov. *Biopolymers*, 35, 75 (1995).

8. V.F. Morozov, A.V. Badasyan, A.V. Grigoryan, M.A. Sahakyan, E.Sh. Mamasakhlisov. Biopolymers, 75, 434 (2004).
9. A.V. Badasyan, A.V. Grigoryan, E.Sh. Mamasakhlisov, A.S. Benight, V.F. Morozov. J. Chem. Phys., 123, 194701 (2005).
10. V.F. Morozov, A.V. Badasyan, A.V. Grigoryan, M.A. Sahakyan, E.Sh. Mamasakhlisov. Mod. Phys. Lett. B, 19, 79 (2005).
11. А.В. Бадасян, А.В. Григорян, А.Ю. Чухаджян, Е.Ш. Мамасакхлисов, В.Ф. Морозов. Изв. НАН Армении, Физика, 37, 320 (2002).
12. Е.Ш. Мамасакхлисов, А.В. Бадасян, В.Ф. Морозов Изв. НАН Армении, Физика, 40, 111 (2005).
13. D.C. Poland, H.A. Sheraga. The Theory of Helix-Coil Transition. New York, Acad. Press, 1970.
14. Ф.Р. Гантмахер. Теория матриц. М.—Л., Гостехиздат, 1953.
15. R.J. Baxter. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. London, Academic, 1982.

ՊԱՐՈՒՅՐ-ԿՈՒԿ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐԸ ԵՐԿՈՒ ԸՂԹԱՆԵՐԻ ՄԻՋԵՎ ՓՈԽԱԶԴԵՑՈՒԹՅԱՆ ԱՌԿԱՅՈՒԹՅԱՆ ԴԵՊԶՈՒՄ

Ա.Վ. ԾԱՌՈՒԿՅԱՆ, Ը.Ա. ՏՈՆՈՅԱՆ, Գ.Ն. ՀԱՅՐԱՊԵՏՅԱՆ,
Ի.Վ. ԲԱԴՅԱՆ, Ե.Շ. ՄԱՍԱԿԽԼԻՍՈՎ, Վ.Ֆ. ՄՈՐՈԶՈՎ

Պոլիպեպտիդային շղթայի ընդհանրացված մոդելի հիման վրա դիտարկված են պարույր-կծիկ անցումները երկու շղթաներում, որոնք փոխազդում են կողք-կողքի, ընդ որում զոյություն ունեն չորս տեսակի փոխազդեցություններ (hh, hc, ch, cc): Համակարգի համիլտոնյանը իր մեջ է ներառում ՊԸԸՄ-ի բազային համիլտոնյանները երկու շղթաների համար և անդամ, որը պայմանավորված է փոխազդեցություններով: Ցույց է տրված, որ մույնատիպ (hh, cc) փոխազդեցության էներգիայի գերակշռումը խառը (hc, ch) տիպի փոխազդեցության էներգիայի նկատմամբ հանգեցնում է կոռելյացիոն երկարության կտրուկ աճին և հալման միջակայքի նվազմանը: Համակարգի ոչ տրիվյալ պահվածք է դիտվում հակառակ դեպքում, երբ գերակշռում է խառը տիպի (hc, ch) փոխազդեցության էներգիան մույնատիպ (hh, cc) փոխազդեցության էներգիայի նկատմամբ:

HELIX-COIL TRANSITIONS IN THE CASE OF INTERACTION BETWEEN TWO CHAINS

A.V. TSARUKYAN, S.H.A. TONoyAN, G.N. HAYRAPETYAN,
I.V. BAGHDYAN, Y.SH. MAMASAKHLISOV, V.F. MOROZOV

Based on the generalized model of polypeptide chain the helix-coil transition in two chains, which are interacting abreast, is studied. There are four types of interaction (hh, hc, ch, cc). The Hamiltonian of system includes the basic Hamiltonian for two chains and the term which is responsible for interactions. It is shown that, when the energy of one type interaction (hh, cc) is more than the energy of mixed-type interaction (hc, ch), the correlation length grows sharply and melting interval becomes narrower. The system has a nontrivial behavior when the energy of mixed-type interactions (hc, ch) is higher than that of the one-type interaction (hh, cc). In this case one can observe the growth of the correlation length, and the melting curve has a two-stage character. The portion of junctions and the average length of helical fractions show that the merging and breakup of helical fractions take place.