

индекс 3624

Препринт ЕФИ-1026(76)-87

ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱԶԻ ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ  
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ  
YEREVAN PHYSICS INSTITUTE

---

Մ.Ա.ԱԳՐՅԱՆ, Ն.Տ.ԱՆԱՆԻԿՅԱՆ,

Է.Մ.ՄԱՄԱՏԱԽԼԻՍՈՎ, Վ.Փ.ՄՈՐՈԶՈՎ

ПЕРЕХОД СПИРАЛЬ-КЛУБОК В ПОЛИПЕПТИДАХ.  
МИКРОСКОПИЧЕСКИЙ ПОДХОД



ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ЦНИИАтоминформ  
ЕРЕВАН — 1987

Ամփոփում EBM-1026(76)-87

Ն.Ս. ԱՆԱՆԻԿՅԱՆ, Ե. Շ. ՄԱՄԱՍԱԽԼԻՍՈՎ\*, Վ.Փ. ՄԱՐՈՋՈՎ\*,  
Շ.Ա. ՀԱՅՐՏՅԱՆ\*\*

ԳԱԼԱՐ-ԿԵԻԿ ԱՆՑՈՒՄԸ ՊՈԼԻՊԵՊՏԻՆՆԵՐՈՒՄ,  
ՄԱՄԱՐԻԻՏԱԿԱՑՈՒՄՆԵՐԻ ՄՈՏԵՑՈՒՄ

Առաջարկվում է զալար-կծիկ անցման սպինային ցանցային մոդել  
պոլիպեպտիդներում: Ստացված է նրա մշակում լուծումը, և ուսումնա-  
սիրված թերմոդինամիկական բնութագրերը: Աշխատանքում կառուցված  
տեսությունը թույլ է տալիս եզրակացություն անել մեկ շրջանային  
կապով կապված պտտման զույգերի թվի կենսաբանական իմաստի մասին:  
Ցույց է տրված, որ ձիմի և Բրեգի տեսության պարամետրերը կարող  
են հաշվարկվել առաջարկված մոդելի սկզբմասներում, որպես նրա միջի-  
նացված բնութագրեր:

Երևանի ֆիզիկայի ինստիտուտ

Երևան 1987

\* Երևանի պետական համալսարան

\*\* Հայկական ԳԱ մանրէաբանության ինստիտուտ

Preprint EBM-1026(76)-87

\*\*Sh.AJRYAN, N.S.ANANIKYAN. \*E.Sh.MAMASAKHLISOV  
\*V.F.MOROZOV

A spin lattice model of spiral-to-ball transition in poly-  
peptides is proposed. Its exact solution is obtained thermo-  
dynamical characteristics are investigated. The constructed  
theory allows one to make some conclusions on biological mean-  
ing of the number of rotation pairs fixed by one hydrogen bond.  
It is shown that the parameters of Zimm and Bragg theory [1]  
can be calculated in the framework of this model as averaged  
values of some its characteristics.

Yerevan Physios Institute

Yerevan 1987

\* Yerevan State University

\*\* Institute of microbiology of the Academy of Science of  
Armenian SSR.

УДК 53.001.1:678.74/36

Ш. А. АЙРЯН,\*\* Н. С. АНАНИКЯН, Е. Ш. МАМАСАХЛИСОВ,\*  
В. Ф. МОРОЗОВ\*

ПЕРЕХОД СПИРАЛЬ-КЛУБОК В ПОЛИПЕПТИДАХ.  
МИКРОСКОПИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Предложена спиновая решеточная модель перехода спираль-клубок в полипептидах. Получено её точное решение и исследованы её термодинамические характеристики. Построенная в работе теория позволяет сделать предположение о биологическом смысле числа пар вращений, фиксируемых одной водородной связью. Показано, что параметры теории Зимма и Брегга [1] могут быть вычислены в рамках предложенной модели как некоторые её усредненные характеристики.

Ереванский физический институт  
Ереван 1987

\* Ереванский государственный университет

\*\* Институт микробиологии АН АрмССР

Введение

Для функционирования биополимеров важное значение имеют происходящие в них различные конформационные переходы. В связи с этим и представляет интерес изучение перехода спираль-клубок в полипептидах. При подобных переходах макромолекулы ведут себя как одномерные кооперативные системы. Эта кооперативность определяется как взаимозависимостью конформаций последовательных повторяющихся единиц, так и геометрией внутримолекулярных водородных связей.

В настоящей работе продолжено микроскопическое рассмотрение перехода спираль-клубок в полипептидах, основанное на многокомпонентной спиновой модели полипептидной цепи. Модель была сформулирована в первых работах [2,3], посвященных данному вопросу.

Модельный гамильтониан

В этом разделе будет лишь кратко повторена формулировка модели.

Поставим каждой паре углов вращения  $\{\varphi_i, \psi_i\}$  (рис. I) в соответствие спиновую переменную  $\sigma_i$ , принимающую значения  $\sigma_i = 1, 2, \dots, Q$ . Предполагается, что все спиновые состояния равновероятны, и только одно из них соответствует  $\alpha$ -спиральной конформации. Обозначим это состояние номером I. Внутримолекулярная водородная связь образуется лишь тогда, когда три подряд спина находятся в состоянии I.

Гамильтониан такой системы записывается как

$$H_0 = -U \sum_{i=1}^N \delta_{\sigma_{i-2}, 1} \delta_{\sigma_{i-1}, 1} \delta_{\sigma_i, 1} \quad (1)$$

где  $U$  - энергия, выделяющаяся при образовании одной водородной связи;  $N$  - число повторяющихся единиц в цепи;  $\delta_{m,n}$  - символ Кронекера; суммирование  $\sum$  производится по всем повторяющимся единицам.

Высказанное выше предположение о равновероятности спиновых состояний неверно. Однако легко показать, что модель с различными статистическими весами получается из данной модели путем замены параметра  $Q$  на величину  $\tilde{Q} = \sum_{\alpha=1}^Q \frac{W_\alpha}{W_1}$ , где  $W_\alpha$  - статистический вес спинового состояния  $\alpha$ .

#### Статистическая сумма

В работе [3] было получено выражение для расчета статистической суммы модели. Оно достаточно громоздко и не совсем удобно для расчетов при больших  $N$ . Поэтому более целесообразно использовать в дальнейшем представление статистической суммы

в матричном виде. Для получения этого представления используется хорошо известная процедура [4]. Имеем тройку повторяющихся единиц  $\{i-2, i-1, i\}$ .  $(i-1)$ -й повторяющейся единице приписывается возможность находиться в двух спиновых состояниях сразу  $\sigma'_{i-1}$  и  $\sigma_{i-1}$ . После чего соответствующие статистические веса в матрице принимаются равными нулю. Таким образом, имеем следующую матрицу статистических весов:

$$G = \begin{pmatrix} e^{U/T} & 1 & \dots & 10 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 1 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 1 & \dots & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 1 & \dots & 10 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 1 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

При циклических граничных условиях статистическая сумма определяется выражением

$$Z = \text{Sp}(G^N) \quad (3)$$

Сделаем обозначение  $v = e^{U/T} - 1$ .

Структура матрицы  $G$  позволяет предположить, что среди множества её собственных чисел много тривиальных. Свернув секулярное уравнение матрицы  $G$ , можно убедиться в том, что нетривиальные собственные значения матрицы  $G$  определяются уравнением

$$\lambda^3 - \lambda^2(v+a) + \lambda v(a-1) + v(a-1) = 0 \quad (4)$$

Из выражения (3) по теореме Фробениуса [5] следует, что при  $N \gg 1$

$$Z = \lambda_1^N \quad (5)$$

где  $\lambda_1$  - старший корень уравнения (4).

Можно показать [3], что

$$\theta = \frac{v+1}{Nz} \frac{\partial z}{\partial v} \quad (6)$$

Следовательно, при  $N \rightarrow \infty$

$$\theta = (v+1) \frac{\partial \lambda_1}{\partial v} \quad (7)$$

Полученные выражения позволяют производить численные расчеты.

#### Корреляционная длина

Как уже упоминалось выше, при переходах спираль-клубок макромолекулы ведут себя как одномерные кооперативные системы. В связи с этим представляет интерес определить корреляционную длину рассматриваемой системы и исследовать её поведение.

Корреляционная функция модели определяется как

$$G_{ij} = \langle \delta_{\sigma_{i-1},1} \delta_{\sigma_i,1} \delta_{\sigma_{i+1},1} \delta_{\sigma_{j-1},1} \delta_{\sigma_j,1} \delta_{\sigma_{j+1},1} \rangle - \langle \delta_{\sigma_{i-1},1} \delta_{\sigma_i,1} \rangle \times \langle \delta_{\sigma_{j-1},1} \delta_{\sigma_j,1} \delta_{\sigma_{j+1},1} \rangle \quad (8)$$

Будем предполагать, как обычно, что  $G_{ij}$  экспоненциально затухает с ростом  $|j-i|$ :

$$G_{ij} = A e^{-|j-i|/\xi} \quad (9)$$

где  $\xi$  - корреляционная длина.

Можно показать, что в пределе  $N \rightarrow \infty$

$$\text{cth}(1/2\xi) = (v+1) \frac{(\partial\theta/\partial v)}{\theta(1-\theta)} \quad (10)$$

Делается это следующим образом:

$$\theta = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \langle \delta_{\sigma_{l-1},1} \delta_{\sigma_l,1} \delta_{\sigma_{l+1},1} \rangle = \langle \delta_{\sigma_{j-1},1} \delta_{\sigma_j,1} \delta_{\sigma_{j+1},1} \rangle = \frac{v+1}{Nz} \frac{\partial z}{\partial v}.$$

Сделаем обозначение  $K = \mu/T$ , Тогда:

$$\frac{v+1}{Nz} \frac{\partial z}{\partial v} = \frac{1}{Nz} \frac{\partial z}{\partial K}.$$

Рассмотрим среднее от произведения  $\sum_l \delta_{\sigma_{l-1},1} \delta_{\sigma_l,1} \delta_{\sigma_{l+1},1}$

$$\sum_l \delta_{\sigma_{j-1},1} \delta_{\sigma_j,1} \delta_{\sigma_{j+1},1} \frac{1}{z} \frac{\partial^2 z}{\partial K^2} = \langle \sum_l \delta \delta_l \delta \sum_l \delta \delta_l \delta \rangle = N\theta + N(N-1)\theta^2 + 2A \left[ \frac{N-1}{e^{v/2}-1} - \frac{1-e^{-N/2}}{(e^{v/2}-1)^2} \right] \quad (II)$$

Вместе с тем  $A = G_{ij}(i=j)$ . Следовательно,  $A = \theta(1-\theta)$ .

Можно показать, что имеет место тождество

$$N\theta' = (Z'_{kk}/Z) - (N\theta)^2.$$

С учетом этого тождества из (II) следует, что

$$\theta' = \theta(1-\theta) \text{cth}(1/2\xi) + \frac{2\theta(1-\theta)}{N(e^{v/2}-1)} (e^{-N/2}-1). \quad (12)$$

С корреляционной длиной тесно связана такая макроскопическая величина  $\ell$ , характеризующая переход спираль клубок, как среднее число повторяющихся единиц, приходящихся на один спиральный участок, а также среднее число спиральных участков цепи. Очевидно, что среднее число повторяющихся единиц на спиральный участок определяется выражением

$$\ell = N\theta/j,$$

где  $j$  - среднее число спиральных участков цепи. Так как

$$j = \langle \sum_i \delta \delta_i (1 - \delta_{i+1}) \rangle ,$$

то  $j = N\theta(1-\theta)(1-e^{-V/\theta})$ . А значит и

$$\rho = \frac{1}{(1-\theta)(1-e^{-V/\theta})} .$$

Численные расчеты, проведенные на основе этих соотношений, показывают, что корреляционная длина имеет максимум в области  $v=q$

#### Поведение модели с различными топологиями замыкания водородных связей

В предыдущих разделах была рассмотрена модель, в которой образование одной водородной связи происходит при фиксации трех последовательных единиц в одном спиновом состоянии. Вызывает естественный интерес то, как будут вести себя модели с другими количествами пар вращения, фиксируемыми одной водородной связью. Обозначим число пар вращения, фиксируемых одной водородной связью как  $\Delta$ .

Очевидно, что при  $\Delta = 1$  вместо старшего корня уравнения (4), как это имело место для  $\Delta = 3$ , можно использовать число  $\lambda = v + q$ . Рассмотрим теперь случай  $\Delta = 2$ . Тогда матрица статистических весов  $G_2$  имеет вид [4]:

$$G_2 = \begin{pmatrix} v+1 & 1 \dots 1 \\ 1 & 1 \dots 1 \\ \dots & \dots \\ 1 & 1 \dots 1 \end{pmatrix} \quad (13)$$

Нетривиальные собственные числа этой матрицы удовлетворяют следующему уравнению:

$$\lambda^2 - \lambda(v+q) + v(q-1) = 0. \quad (14)$$

Не вдаваясь в подробности, отметим, что для случая  $\Delta$  матрица статистических весов имеет вид

$$G_\Delta = \begin{pmatrix} v+1 & 1 \dots 1 & 0 \dots 0 & \dots & 0 \dots 0 \\ 0 & 0 \dots 0 & 1 \dots 1 & \dots & 0 \dots 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 \dots 0 & 0 \dots 0 & \dots & 1 \dots 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 1 & 1 \dots 1 & 0 \dots 0 & \dots & 0 \dots 0 \\ 0 & 0 \dots 0 & 1 \dots 1 & \dots & 0 \dots 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 \dots 0 & 0 \dots 0 & \dots & 1 \dots 1 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

А нетривиальные собственные числа этой матрицы определяются уравнением

$$\lambda^\Delta - \lambda^{\Delta-1}(v+q) + \lambda^{\Delta-2}v + \lambda v(q-1) + v(q-1) = 0. \quad (16)$$

Таким образом, доказано, что по крайней мере для  $\Delta = 1, 2, 3, 4$  нетривиальные собственные числа матрицы статистических весов определяются уравнением вида

$$\lambda^\Delta - \lambda^{\Delta-1}(v+q) + v(q-1) \sum_{i=0}^{\Delta-2} \lambda^i = 0. \quad (17)$$

Можно предполагать, что это имеет место для любых  $\Delta$ .

Возникает резонный вопрос. Как зависит точка перехода от величины  $\Delta$ ? Для определения точки перехода поступим следующим образом. Преобразуем уравнения (4), (13) и (15) к следующему виду

$$\begin{aligned} \lambda &= (v+q) - v(q-1)^{1/\lambda} & \Delta &= 2, \\ \lambda &= (v+q) - v(q-1)[1/\lambda^2 + 1/\lambda] & \Delta &= 3, \\ \lambda &= (v+q) - v(q-1)(1/\lambda^3 + 1/\lambda^2 + 1/\lambda) & \Delta &= 4. \end{aligned} \quad (18)$$

Эти выражения удобны для высоко- и низкотемпературного разложения. Из уравнений видно, что в нулевом приближении (для итерационного поиска)

$$\lambda_{BT} = q, \quad \lambda_{HT} = v.$$

Сшивая высоко- и низкотемпературное разложения, получаем в нулевом приближении точку сшивки как  $v=q$ . А в работе [2] было показано, что вблизи точки  $v=q$ ,  $\Theta \approx 1/2$ , и, что  $v=q$  можно рассматривать как точку перехода. Точку сшивки HT и BT разложения можно рассматривать как точку перехода. Легко показать, что  $v=q$  есть точка сшивки в любом приближении и для любых  $\Delta$ . Таким образом, точка перехода не чувствительна к величине  $\Delta$  и определяется соотношением

$$T_m = \frac{u}{\ln(1+q)} \quad (19)$$

#### Полипептидная цепь с растворителем

Биополимеры функционируют в различных растворителях. Поэтому рассмотренная выше модель нуждается в учете влияния растворителя.

Рассмотрим полипептидную цепь в окружении растворителя, молекулы которого образуют водородные связи с  $>N-H$  и  $>C=O$  группами. Определим модель такого растворителя следующим образом.

Пусть: 1) если соответствующие  $>N-H$  и  $>C=O$  группы полипептидной цепи не связаны внутримолекулярными водородными связями, то молекулы растворителя образуют с этими  $>N-H$  и  $>C=O$  группами межмолекулярные водородные связи; 2) образование межмолекулярной водородной связи происходит при вполне определенной ориентации молекулы растворителя относительно данной группы (ориентации предполагаются дискретными, в количестве  $q$ ); 3) каждой ориентации приписывается спиновая переменная  $S_i$  и спиновая переменная  $\mu_i$  (для  $>N-H$  и  $>C=O$  групп, соответственно);  $S_i, \mu_i = 1, 2, \dots, q$ ; при этом значение  $q$  спиновых переменных  $S_i$  и  $\mu_i$  соответствует образованию соответствующих водородных связей, с выделением энергии  $E$ .

Гамильтониан такой системы записывается как

$$H = H_0 - E \sum_{i=1}^N (1 - \delta_{S_i} \delta_{\mu_i}) (\delta_{S_{i,1}} + \delta_{\mu_{i,1}}), \quad (20)$$

где  $H_0$  - гамильтониан, определенный выражением (1). Введем обозначения  $w = e^{\epsilon/T} - 1$  и  $\delta_{S_{i-1}, S_i}, \delta_{S_i, S_{i+1}}, \delta_{\mu_{i-1}, \mu_i}, \delta_{\mu_i, \mu_{i+1}} = \delta_{S_i} \delta_{\mu_i}$ . Тогда статистическая сумма этой модели определяется следующим образом

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{S_i\}} \sum_{\{S_i\}} \sum_{\{\mu_i\}} \prod_i (1 + v \delta_{S_i} \delta_{\mu_i}) [1 + w(1 - \delta_{S_i} \delta_{\mu_i}) \delta_{S_{i,1}}] [1 + w(1 - \delta_{S_i} \delta_{\mu_i}) \delta_{\mu_{i,1}}] = \\ &= \sum_{\{S_i\}} \sum_{\{S_i\}} \sum_{\{\mu_i\}} \prod_i [1 + v \delta_{S_i} \delta_{\mu_i} + w(1 - \delta_{S_i} \delta_{\mu_i})(\delta_{S_{i,1}} + \delta_{\mu_{i,1}}) + w^2(1 - \delta_{S_i} \delta_{\mu_i}) \delta_{S_{i,1}} \delta_{\mu_{i,1}}] = \\ &= \sum_{\{S_i\}} \prod_i [q^2(1 + v \delta_{S_i} \delta_{\mu_i}) + 2qw(1 - \delta_{S_i} \delta_{\mu_i}) + w^2(1 - \delta_{S_i} \delta_{\mu_i})] = (q+w)^{2N} \times \\ &\times \sum_{\{S_i\}} \prod_i (1 + \tilde{v} \delta_{S_i} \delta_{\mu_i}). \end{aligned}$$

Это в точности соответствует статистической сумме модели с гамильтонианом (I), если заменить величину  $(1+v)$  на  $1+\tilde{v} = \frac{1+v}{(1+w/q)^2}$ . Можно показать, что функция  $\tilde{V}(T)$  обладает следующими свойствами

$$\tilde{V}_{\max} = \tilde{V}(T_{\max}), \quad T_{\max} = \frac{E}{\ln\left(\frac{q-1}{\frac{E}{U}-1}\right)},$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \tilde{V}(T) = 1,$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} \tilde{V}(T) = \begin{cases} 0, & 2E > u \\ \infty, & u > 2E \\ q^2, & u = 2E \end{cases}.$$

Различные виды зависимостей  $\tilde{V}(T)$  приведены на рис. 2.

Очевидно, что зависимости всех термодинамических характеристик системы от величины  $\tilde{V}$  подобны соответствующим зависимостям от  $v$  для модели с гамильтонианом (I). Следовательно, зависимости характеристик системы от температуры  $T$  будут определяться видом зависимости  $\tilde{V}(T)$ .

#### Сравнение с теорией Зимма и Дрефта

Переход спираль-глубок в полипептидах ранее описывался в множестве работ. Однако все они сводятся к теории Зимма и Брегга [1]. В своем упрощенном виде эта теория выглядит следующим образом. Матрица статистических весов имеет вид

$$G = \begin{bmatrix} G(0,0) & G(0,1) \\ G(1,0) & G(1,1) \end{bmatrix}. \quad (21)$$

Элемент матрицы  $G(\alpha, \beta) = \exp(-\mathcal{F}_i(\alpha, \beta)/T)$ , где  $\mathcal{F}_i(\alpha, \beta)$  это свободная энергия  $i$ -й повторяющейся единицы, находящейся в состоянии  $\beta$ , если  $(i-1)$ -я повторяющаяся единица находится в состоянии  $\alpha$ . При этом  $\alpha, \beta = 0, 1$ . Здесь 0 соответствует нахождению повторяющейся единицы в свободном состоянии, а 1 - в спиральном. Матрица (21), исходя из определенных физических соображений, записывается как

$$G = \begin{bmatrix} 1 & b s \\ 1 & s \end{bmatrix}. \quad (22)$$

На физическом смысле  $b$  и  $s$  мы здесь останавливаться не будем. Можно показать, что статистическая сумма системы,  $i$ -я и  $(i-1)$ -я повторяющиеся единицы которой находятся в состояниях  $\beta$  и  $\alpha$ , соответственно, может быть записана как

$$\begin{aligned} Z(0,0) &= Z(1-\theta)[1-\theta(1-e^{-V/b})], \\ Z(0,1) &= Z(1,0) = Z\theta(1-\theta)(1-e^{-V/b}), \\ Z(1,1) &= Z\theta[\theta + (1-\theta)e^{-V/b}]. \end{aligned} \quad (23)$$

След матрицы (21) может быть записан как

$$S_p G^N = S_p \begin{bmatrix} Z(0,0) & Z(0,1) \\ Z(1,0) & Z(1,1) \end{bmatrix}^N.$$

Очевидно, что

$$S_p G^N = S_p ((A^{-1}GA)^N),$$

где  $A$  - произвольная матрица. Выберем в качестве  $A$  матрицу

$$A = \begin{bmatrix} e^{-a} & 0 \\ 0 & e^a \end{bmatrix},$$

причем  $e^{2a} = \frac{z(0,0)}{z(1,1)}$ , Следовательно,

$$A^{-1}BA = z(0,0) \begin{bmatrix} 1 & (z(1,0)/z(0,0))^2 \\ 1 & (z(1,1)/z(0,0))^2 \end{bmatrix}$$

и в качестве матрицы статистических весов можно рассматривать

$$G = \begin{bmatrix} 1 & (z(1,0)/z(0,0))^2 \\ 1 & (z(1,1)/z(0,0))^2 \end{bmatrix}. \quad (24)$$

Параметр  $S$  определяется соотношением

$$S = \frac{z(1,1)}{z(0,0)} = \left( \frac{\theta}{1-\theta} \right) \cdot \frac{\theta + (1-\theta)e^{-V_2}}{1-\theta(1-e^{-V_2})}$$

Обозначим  $\frac{1}{V_2} = x$ . Тогда при  $x \ll 1$

$$S \approx \left( \frac{\theta}{1-\theta} \right) [1 + (2\theta-1)x + \theta(1-2\theta)x^2]$$

Следовательно, при  $x \ll 1$  в точке полуперехода  $S = 1$ . Следует отметить, что в теории Зимма-Брегга точка полуперехода определяется аналогичным образом. Так как  $\theta S = \left( \frac{z(1,0)}{z(0,0)} \right)^2$ , то

$$\theta = \frac{z^2(1,0)}{z(0,0)z(1,1)}$$

Следовательно при  $x \ll 1$

$$\theta \approx \theta(1-\theta)x^2.$$

В теории Зимма-Брегга для совпадения с экспериментом выбирается  $\theta \ll 1$  ( $\theta \approx 10^3 - 10^4$ ). А в нашей модели  $x \ll 1$  при  $Q \gg 1$ .

Таким образом, можно утверждать, что при  $Q \gg 1$  наша модель дает теорию Зимма-Брегга с параметрами

$$S \approx \left( \frac{\theta}{1-\theta} \right) [1 + (2\theta-1)x + \theta(1-2\theta)x^2],$$

$$\theta \approx \theta(1-\theta)x^2.$$

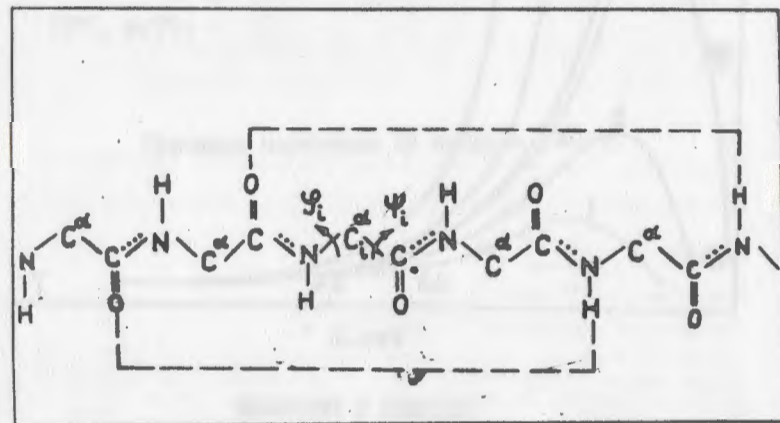


Рис. I

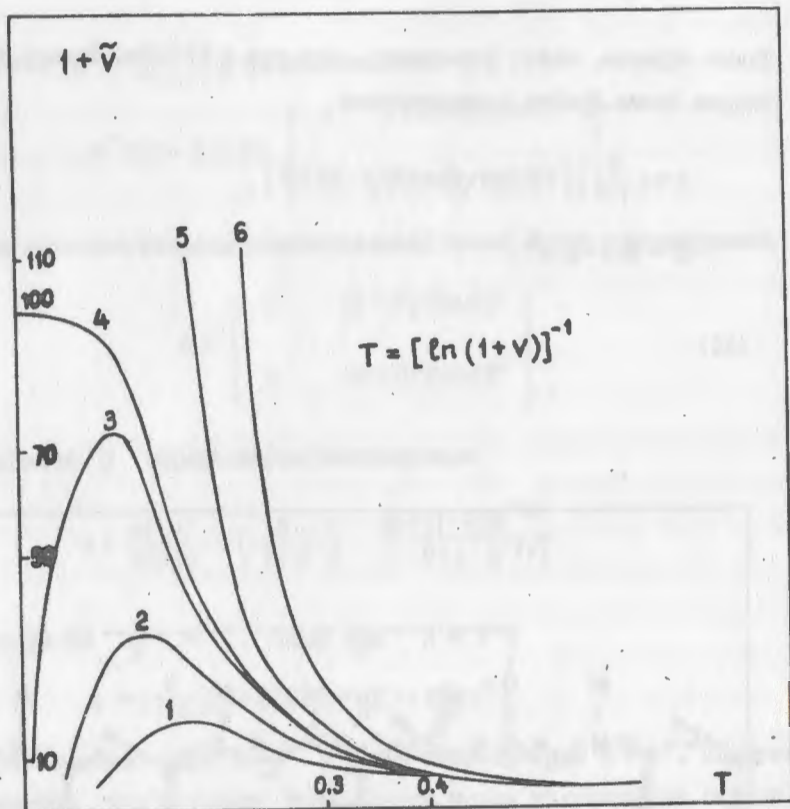


Рис. 2

ПОДПИСИ К РИСУНКАМ

Рис. 1 Структура полипептидной цепи и топология замыкания водородных связей в  $\alpha$ -спирали.

Рис. 2 Температурная зависимость параметра  $\tilde{v}$  :  $q = 10$ ,  
 (1) -  $\alpha = 0,6$ ; (2) -  $\alpha = 0,55$ ; (3) -  $\alpha = 0,51$ ;  
 (4) -  $\alpha = 0,5$ ; (5) -  $\alpha = 0,4$ ; (6) -  $\alpha = 0$ .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zimm B., Bragg J. Theory of phase-transition between helix and random coil in polypeptide chains. Ibid, 1959, vol. 31, p. 254
2. Айрян Ш.А., Ананикян Н.С., Морозов В.Ф. Решеточная модель полипептидной цепи. Препринт ЕФИ-821(48)-85, Ереван, 1985.
3. Айрян Ш.А., Ананикян Н.С., Морозов В.Ф. Расчет параметров феноменологической теории перехода спираль-клубок в полипептидах на основе микроскопической модели. Биофизика, 1987, т. 32, с. 394.
4. Флори П. Статистическая механика цепных молекул. М.: Мир, 1971, с. 79.

Рукопись поступила 28 августа 1987 г.

Ш. А. АЙРЯН, Н. С. АНАНИКЯН, Е. Ш. МАМАСАХЛИСОВ, В. Ф. МОРОЗОВ  
ПЕРЕХОД СПИРАЛЬ-КЛУБОК В ПОЛИПЕПТИДАХ. МИКРОСКОПИЧЕСКИЙ  
ПОДХОД.

Редактор Л. П. Мукаян  
Технический редактор А. С. Абрамян

Подписано в печать 17/ХП-87г. ВВ-09554 Формат 60x84/16  
Офсетная печать. Уч. изд. л. 1,0 Тираж 299 экз. Ц. 15 к.  
Зак. тип. № 755 Индекс 3624

Отпечатано в Ереванском физическом институте  
Ереван 36, Маркаряна 2

The address for requests:  
Information Department  
Yerevan Physics Institute  
Markaryan St., 2  
Yerevan, 375036  
Armenia, USSR