

26 октября 2020

Шайтан Константин Вольдемарович
*Математические проблемы формирования
уникальных пространственных структур
линейных биополимеров*

В докладе рассматриваются математические проблемы динамики фолдинга или динамики спонтанного сворачивания линейных полимерных цепей в уникальные пространственные структуры. До сих пор отсутствует как четкое понимание механики внутренних движений длинных шарнирно-сочлененных цепей, так и физических закономерностей формирования ультрамногомерных поверхностей потенциальной энергии с глобальным минимумом, которые необходимы для 100% реализации строго определенных конфигураций свернутой цепи (без этого феномен жизни невозможен!).

В первой части доклада рассматривается механика движений длинной шарнирно-сочлененной цепи в вязкой среде. Процессы фолдинга биополимеров происходят в водном растворе. Вода для молекулярных движений является очень сильно вязкой жидкостью. В системе уравнений движения узлов цепи в сильно вязкой среде инерциальными членами можно пренебречь. Предлагается многомерный геометрический подход для вывода закономерностей движения шарнирно-сочлененных цепей в вязкой среде. Результат состоит в том, что скорость диссипации энергии узлов цепи почти равномерно размазана по всей цепи. Это приводит к определенным правилам движения репрезентативной точки по многомерным энергетическим поверхностям, которые образно формулируются как принцип “начинающего горнолыжника” — репрезентативная точка объезжает резкие неровности потенциальной поверхности с относительно низкой размерностью. Имеют место также экстремальные принципы для динамики сворачивания - принцип максимальной скорости уменьшения потенциальной энергии и, одновременно, минимум скорости диссипации энергии.

Во второй части доклада (если успеем?) рассматриваются принципы формирования многомерных энергетических поверхностей для линейных полимерных (биополимерных) цепей. Основная идея заключается в том, что пространство конфигураций полимерной цепи имеет топологию многомерного тора и функция потенциальной энергии должна быть представлена в виде многомерного ряда Фурье. При этом на коэффициенты разложения должны быть наложены определенные условия, смысл которых проясняется при сравнении экспериментально наблюдаемых эффектов для фолдинга и предсказаний теории. Суть состоит в том, что коэффициенты разложения есть функции определенных инвариантов алгебраических векторов номеров гармоник членов ряда Фурье. При таком рассмотрении возникают и некоторые идеи для физико-химической эволюции линейных полимеров, из которых могли получиться протоформы функциональных биополимеров.

**НАУЧНЫЙ СЕМИНАР
“ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ ГЕОМЕТРИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ”**

Руководитель – академик А. Т. Фоменко

Семинар проходит онлайн в ZOOM по понедельникам с 17:45 до 19:20

Ссылка на адрес конференции посылается только зарегистрированным пользователям

Мы включим Вас в рассылку после рекомендации от любого участника семинара

Анонсы предыдущих докладов можно посмотреть на сайте семинара

<http://dfgm.math.msu.su/chairsem.php>