

15 ноября 2021

Константин Вольдемарович Шайтан

Как многомерная геометрия помогает понять физику формирования пространственной структуры биополимеров

В докладе рассматриваются вопросы динамики линейных полимеров в вязких средах и проблемы формирования уникальных пространственных структур биополимеров (белков и др.). Роль вязкости среды состоит в том, что в уравнениях движения при изучении динамики конформационных движений инерциальными членами можно пренебречь. С использованием общих свойств симметрии для межатомных взаимодействий формулируется закон сохранения для суммы векторов вращений вокруг связей при конформационных движениях шарнирной цепи в вязкой среде. Задача о динамике конформационных движений (за счет поворотов вокруг связей) линейной полимерной цепи в вязкой среде сводится к задаче вращения центра гиперсферы, описывающей закон сохранения энергии по поверхности другой гиперсферы, радиус которой равен половине радиуса гиперсферы, которая описывает скорость диссипации энергии. Решение системы уравнений механики для конформационных движений в вязкой среде задается точкой касания гиперсферы диссипации энергии и гиперсферы закона сохранения энергии. В пределе больших размерностей (числа узлов полимерной цепи) средние скорости диссипации энергии оказываются практически одинаковыми для всех узлов цепи (кроме крайних). Основной вывод из проведенного рассмотрения состоит в том, что движение репрезентативной точки по многомерной поверхности потенциальной энергии подчиняется (статистически) определенному правилу — репрезентативная точка стремится избегать областей, в которых происходит резкое изменение потенциальной энергии по относительно небольшому числу степеней свободы. Это правило того же порядка, что и хорошо известное правило, например, для системы большого числа частиц при заданной температуре T — крайне маловероятно, чтобы значительная доля частиц имела, например, энергию, которая резко отличается от средней тепловой энергии. Эти соображения используются далее при обсуждении парадокса сходимости потенциальной энергии макромолекулярной системы, которая представляется как сумма парных атом-атомных взаимодействий.

Вторая часть доклада посвящена вопросам топографии многомерных энергетических поверхностей биополимеров, которые формируют уникальные пространственные структуры. В отличие от проблемы формирования кристаллических структур в случае биополимеров мы не можем воспользоваться соображениями о плотной укладке шаров. Основная идея предлагаемого подхода состоит в том, чтобы использовать топологию конфигурационного пространства полимера (многомерный тор) и представить поверхность потенциальной энергии в виде многомерного ряда Фурье. Используя соображения симметрии биополимеров относительно перестановки в цепи одинаковых мономерных звеньев, а также ряд экспериментальных фактов предлагается гауссовская модель для зависимости коэффициентов разложения от вектора номеров гармоник. Обсуждаются следствия такого приближения для структуры и динамики биополимеров. Естественным образом возникает параметр характеристической температуры денатурации (или разрушения компактной пространственной структуры) биополимера. Проводится оценка для возможного химического состава полимеров, которые формируют уникальные пространственные структуры в различных условиях (например, на разных планетах). В частности, на нашей планете, порог денатурации белков составляет порядка 60С (или 333К), что согласно излагаемой модели соответствует химическому составу полимеров, в которых формируются водородные связи в водной среде. Исследование выполнено при поддержке Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета “Молекулярные технологии живых систем и синтетическая биология”.

НАУЧНЫЙ СЕМИНАР “ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ ГЕОМЕТРИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ”

Руководитель – академик А. Т. Фоменко

Семинар проходит онлайн в ZOOM по понедельникам с 16:45 до 18:20

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>