

О физических закономерностях самосборки уникальной пространственной структуры линейных биополимеров (белков)

Шайтан К.В.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова

e-mail: shaytan49@ya.ru

DOI: 10.37795/RCEM.2020.41.15.056

Проблема происхождения пространственных форм и динамика самосборки четко воспроизводимых уникальных 3D-структур линейных биополимеров (в частности, белков) активно обсуждается более полувека. Накоплен достаточно большой экспериментальный материал и обнаружен ряд закономерностей, которые нуждаются в осмыслении и построении физической теории процесса самосборки 3D-структуры линейных биополимеров, которые играют ключевую роль в формировании и функционировании живых систем. Понимание механизмов самосборки 3D-структуры (фолдинга), развитие соответствующего математического аппарата и развитие суперкомпьютерной техники в перспективе способно привести к эффективным численным методам предсказания результатов фолдинга и пространственной структуры биополимеров в реальных условиях. Это позволило бы рутинные задачи структурной биологии перенести на цифровую платформу и сосредоточить мощные экспериментальные методы на изучении особенностей структурных изменений при функциональных процессах. Эта часть проблемы существенно более сложная, чем просто определение равновесной (или квазиравновесной) пространственной структуры биополимера. Дело в том, что в функциональных процессах обычно также задействованы и электронные степени свободы, что предъявляет даже в обозримом будущем слишком серьезные требования к вычислительной технике. Поэтому для развития науки в этой области будет очень важно сочетание экспериментальной информации о деталях электронных и атомных перестроек (получаемых, например, с использованием рентгеновских лазеров на свободных электронах) с развитием теоретических и компьютерных подходов и моделей.

На данный момент важной и не решенной проблемой является корректное описание энергетических поверхностей биополимеров, установление их связи с химической структурой макромолекул. Имеется большое число различных силовых полей, основанных на суммировании парных взаимодействий, каждое из которых параметризовано для относительно узкого класса молекулярных структур и хорошо работает вблизи равновесных конфигураций. Однако, процесс самосборки 3D-структуры биополимеров осуществляется из сильно неравновесных конфигураций и необходимо иметь более общие подходы для описания и параметризации энергетических поверхностей.

В работе предлагается новый подход к описанию энергетических поверхностей линейных полимеров, который основан на последовательном