

## ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ПРИ РАСТЯЖЕНИИ СУПЕРСПИРАЛЕЙ

Минин К.А., Жмуров А.А.

Московский физико-технический институт, Лаборатория компьютерного и математического моделирования биологических систем, г. Долгопрудный

Суперспирали представляют собой  $\alpha$ -спирали, закрученные друг относительно друга; обычно содержат от 2 до 7  $\alpha$ -спиралей, могут иметь параллельную или антипараллельную архитектуру. В природе суперспирали довольно часто встречаются в белках, выполняющих механические и регуляторные функции. Благодаря простоте организации суперспиралей, их структура довольно хорошо изучена: гидрофобные аминокислоты помещаются в  $\alpha$ -спирали на заданных позициях, что позволяет сформировать гидрофобное ядро, стабилизирующее суперспираль. Понимание принципов внутренней организации суперспиралей позволяет создавать на их основе новые материалы, включая различные волокна, нанотрубки, сферические клетки.

Благодаря экспериментам на единичных молекулах *in vitro* и *in silico* известно, что  $\alpha$ -суперспирали обладают уникальным откликом на внешнее механическое воздействие, в котором можно выделить три последовательных режима: эластичный, пластичный и нелинейный. В ходе денатурации белка в пластичном режиме происходит перераспределение водородных связей, а вторичная структура преобразуется из  $\alpha$ -спиралей в  $\beta$ -листы. Сила сопротивления молекулы внешнему воздействию при этом остается практически постоянной, а  $\alpha$ - и  $\beta$ -состояния можно рассматривать как две отдельные фазы. Таким образом, при достижении некоторой критической силы, в суперспиральных белках происходит трансформация из  $\alpha$ -состояния в  $\beta$ -состояние, который может быть формализован теорией фазового перехода.

В данной работе методом молекулярного моделирования была детально исследована наномеханика различных суперспиральных структур. Был произведен сравнительный анализ для образцов разной длины, топологии, разного количества параллельных элементов. Также были представлены две математические модели, которые были параметризованы с помощью вычислительных экспериментов. Модель с двумя состояниями определяла  $\alpha$ -состояние как энтропийную пружину, а  $\beta$ -состояние как червеобразную цепь. Данный подход позволил оценить переход в пределах квазистатического равновесия. Модель с двумя состояниями была дополнена теорией фазового перехода Абейратне-Ноулза, что позволило описать поведение системы вдали от термодинамического равновесия. Предложенные модели позволяют описать механический отклик систем на внешнее воздействие, предсказать его зависимость от скорости внешнего воздействия, дают оценку количества аминокислот в каждой из двух фаз.