

УДК 577.22 + 577.212.4 + 577.112.012

Карасев В. А., канд. биол. наук,  
Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»

## О принципах построения цепных полимеров. II. Пространственная структура системы пентафрагментов и алгоритмы формирования вторичных структур

**Ключевые слова:** бионическая наноэлектроника, цепные полимеры, белки, вторичная структура, пентафрагменты, пространственная структура, система булевых гиперкубов

*На основе полученных ранее данных (Карасев. Биотехносфера. 2009, №5) предложена пространственная структура пентафрагментов белков в виде системы из восьми структур, изоморфных булевым гиперкубам  $V^6$ , расположенных в вершинах куба  $V^3$  и связанных между собой однобитовыми переходами. На примере типичной  $\alpha$ -спирали показаны возможности использования данной системы для построения алгоритмов формирования вторичных структур белков и других типов цепных полимеров.*

### Введение

Цепные полимеры являются перспективными материалами для бионической наноэлектроники [1]. Удобной моделью цепных полимеров могут служить белки. В предыдущей работе [2], первой из серии статей, посвященных поиску принципов построения структуры цепных полимеров, были изложены результаты анализа пентафрагментов белков. В итоге была предложена классификация пентафрагментов, пригодная для цепных полимеров, описывающая восемь подклассов пентафрагментов, представленных в виде блочных суперматриц из 64 элементов. Такие суперматрицы могут быть представлены в виде пространственной структуры, изоморфной булеву гиперкубу  $V^6$  [1, 3–5]. В настоящей работе предложены пространственная структура полученных суперматриц и их организация в систему гиперкубов, построенных на вершинах трехмерного куба ( $V^3$ ). С использованием этой системы проведен анализ полученных ранее экспериментальных данных, а также показаны возможности ее использования в алгоритмах построения вторичных структур цепных полимеров. Однако прежде чем переходить к изложению результатов работы, необходимо кратко напомнить

особенности структурной организации булевого гиперкуба  $V^6$ .

Как известно, гиперкуб  $V^6$  является пространственным представлением набора из шести булевых переменных (0 и 1) [3]. В каждой вершине находится набор из шести переменных, который связан с шестью наборами соседних вершин однобитовыми переходами. Ранее мы использовали этот гиперкуб для пространственного представления структуры матриц из шести элементов, описывающих конформации 4-звенного графа [1, 4, 5], расположив в самой верхней вершине матрицу из шести нулей, описывающую несвязный граф, а в самой нижней — матрицу из шести единиц, описывающую полностью связный граф. Его проекция на плоскость представлена на рис. 1, однако, в отличие от работ [1, 4, 5], мы изменили расположение элементов на гиперкубе, придав ему канонический вид, приведенный в книге [3]. Структура гиперкуба содержит семь ярусов, пронумерованных снизу вверх римскими цифрами, а также имеет иерархическую структуру (рис. 1, а). Она распадается на два множества по 32 элемента ( $M_1$  и  $M_2$ , рис. 1, б), которые содержат по два подмножества из 16 элементов ( $SM_1$ ,  $SM_2$  и  $SM_3$ ,  $SM_4$ , рис. 1, в), а подмножества состоят из октетов ( $O_1 - O_2$ , ...,  $O_7 - O_8$ , рис. 1, г).

Внутри гиперкуба элементы октетов связаны в квартеты, имеющие общие четыре переменные. Как видно на рис. 1, а, слева внизу расположен квартет, связывающий вершины октетов  $O_1 - O_4$ , который содержит идентичные переменные в 3–6-м положениях (000 000, 100 000, 010 000 и 110 000).

Наконец, еще одной важной особенностью гиперкуба  $V^6$  является наличие в нем элементов, связанных преобразованием антисимметрии: элементы гиперкуба, расположенные симметрично относительно оси симметрии 2-го порядка (гр. сим.  $C_2$ ), могут быть преобразованы друга в друга по правилу:  $0 \leftarrow \rightarrow 1$ . Например,

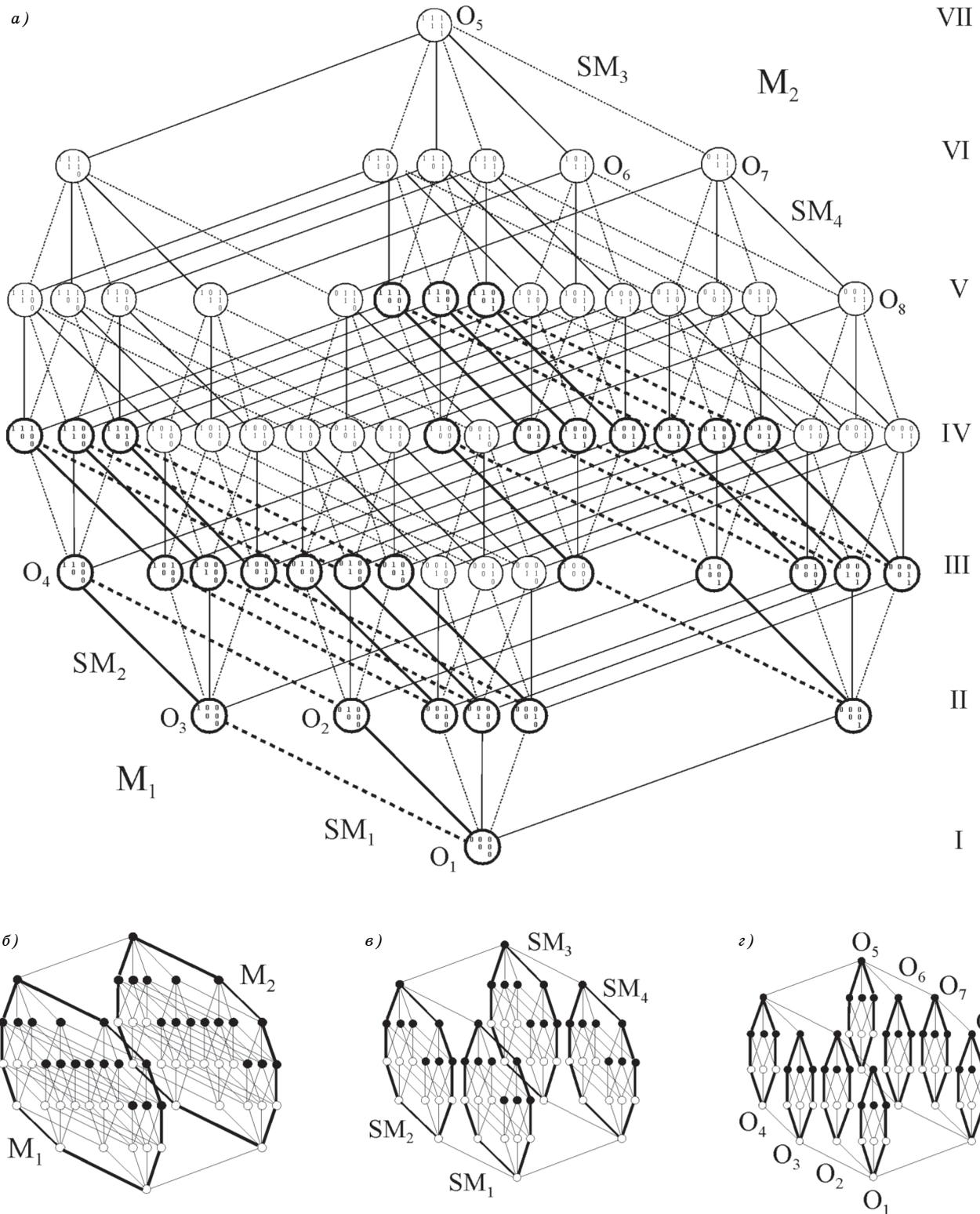


Рис. 1 | Пространственная структура булева гиперкуба  $B^6$

элемент яруса I, содержащий шесть нулей, преобразуется в элемент V II яруса, содержащий шесть единиц, правый элемент 000 001 из яруса II — в левый элемент 111 110 из яруса VI и т. д.

Тот факт, что соседние элементы гиперкуба связаны между собой однобитовыми переходами, позволяет использовать его для разнообразных целей, в частности для построения алгоритмов формирования связей, о чем сообщено в настоящей работе.

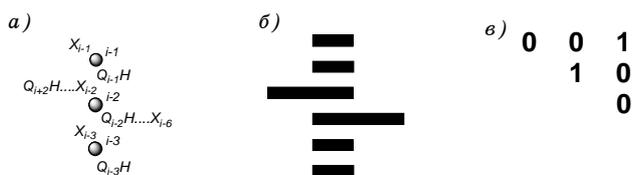
## Результаты и их обсуждение

### 1. ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА СИСТЕМЫ ПЕНТАФРАГМЕНТОВ

#### 1.1. Трансформация блочной суперматрицы в систему псевдогексаграмм

Перенести на гиперкуб элементы суперматрицы (см. табл. 5 из работы [2]) весьма трудно в силу громоздкости цифровой записи. По этой причине была разработана система символов — аналогов пентафрагментов и их связей, прототипом которых являются гексаграммы [6, 7]. Как известно, блоки из шести переменных, гексаграммы содержат в различных сочетаниях палочки с разрывом (0) и палочки без разрыва (1). Взяв эти элементы в качестве аналогов, мы обозначили длинной палочкой элемент пентафрагмента, образующий водородную связь (схема 1), а короткой палочкой — элемент, не образующий водородной связи (0) с основной цепью (схема 1, б):

Схема 1



Сравнение этого обозначения со схемой 1, а, в которой показана центральная часть пентафрагмента с обозначением номеров связей, показывает, что полученная структура, названная псевдогексаграммой (ПГГ), вполне отражает структуру центральной части пентафрагмента. Справа, на схеме 1, в, приведено описание этого фрагмента в виде матрицы из шести булевых переменных [1, 4, 5]. Блочная суперматрица (см. табл. 5 из работы [2]) была преобразована в следующую систему ПГГ (табл. 1).

#### 1.2. Перенос псевдогексаграмм суперматрицы на гиперкуб $V^6$

Полученные структуры, описывающие центральную область пентафрагментов в форме ПГГ, были перенесены на гиперкуб  $V^6$ . Результаты этой работы представлены на рис. 2. Для большей определенности этот гиперкуб отнесен к конкретной группе пентафрагментов, 00 – 00. При этом первая пара переменных 00 и ее ПГГ записаны вверху, над гиперкубом, помещенным в круг, а вторая пара 00 и ее ПГГ — внизу. В соответствии с табл. 5 (в работе [2]), таких структур должно быть восемь. Для них можно использовать аналогичные обозначения.

Как видно на рис. 2, основные закономерности, свойственные гиперкубу (см. введение), не изме-

нились. Сохранены ярусная и иерархическая структуры, подразделение ПГГ на группы квартетов, имеющих общие четыре переменные, расположенные друг над другом по углам гиперкуба. Сохранено также преобразование антисимметрии между ПГГ верхней и нижней частей гиперкуба. Например, фрагмент яруса I (ПГГ с короткими палочками, нет H-связей в основной цепи) преобразуется в симметричный фрагмент яруса VII (ПГГ с длинными палочками, наличие H-связи внутри основной цепи).

### 2. ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА СИСТЕМЫ ПЕНТАФРАГМЕНТОВ

В работе [2] было показано, что пентафрагменты могут иметь максимально 10 водородных связей в структуре цепного полимера. Однако одна из связей,  $Q_i^H \dots X_{i-4}^L$ , повторяется дважды, что приводит к образованию замкнутого цикла. Наличие девяти связей объясняет, почему нами было обнаружено лишь 512 пентафрагментов ( $2^9$ ), а не 1024. Пространственным представлением структур, содержащих 512 вершин, каждая из которых имеет по девять связей с другими вершинами, является 9-мерный гиперкуб — энтенакт [8]. Однако эта структура не подходит для пространственного представления восьми гиперкубов  $V^6$ , так как анализ пентафрагментов на нем сильно затруднен. Учитывая, что  $2^9 = 2^6 \cdot 2^3$ , мы построили эту структуру в виде восьми связанных между собой гиперкубов  $V^6$ , расположенных в вершинах трехмерного куба (рис. 3).

Для этих целей через куб  $V^3$  провели три плоскости (рис. 3): плоскость I проходит перпендикулярно к плоскости листа, плоскость II — параллельно плоскости листа и плоскость III перпендикулярно к двум предыдущим. В самой нижней вершине куба, т. е. под плоскостью III справа от плоскости I и перед плоскостью II, был помещен гиперкуб  $V^6$ , обозначенный как 00 – 00. В вершину, расположенную перед плоскостью II и справа от плоскости I, был помещен гиперкуб, обозначаемый как 01 – 00, т. е. при переходе через плоскость I значение переменных для верхней пары меняется на один бит ( $00 \leftarrow \rightarrow 01$ ), а для нижней остается неизменным. За плоскостью II с той же стороны от плоскости I и под плоскостью III был помещен гиперкуб с парой переменных 00 – 10, т. е. при переходе через плоскость II значение переменных для верхней пары не меняется, а для нижней изменяется на 1 бит ( $00 \leftarrow \rightarrow 10$ ). При этом необходимо отметить, что поскольку гиперкубы помещены в кружки и связаны ребрами куба  $V^3$ , то однобитовые переходы относятся к каждому входящему в гиперкубы элементу, занимающему в них идентичное положение.

В вершину, расположенную над плоскостью III, при неизменном расположении относительно

Таблица 1

Преобразование блочной суперматрицы в систему псевдогексаграмм

$\alpha$ -атом	Тип фрагментов							
	ациклические				циклические			
$i$		00		01		10		11
$i-2$	00				01			
$i-3$ $i-1$	00	01	10	11	00	01	10	11
00								
10								
01								
11								
00								
10								
01								
11								
$i-2$	10				11			
$i-4$			00				01	
			10				11	

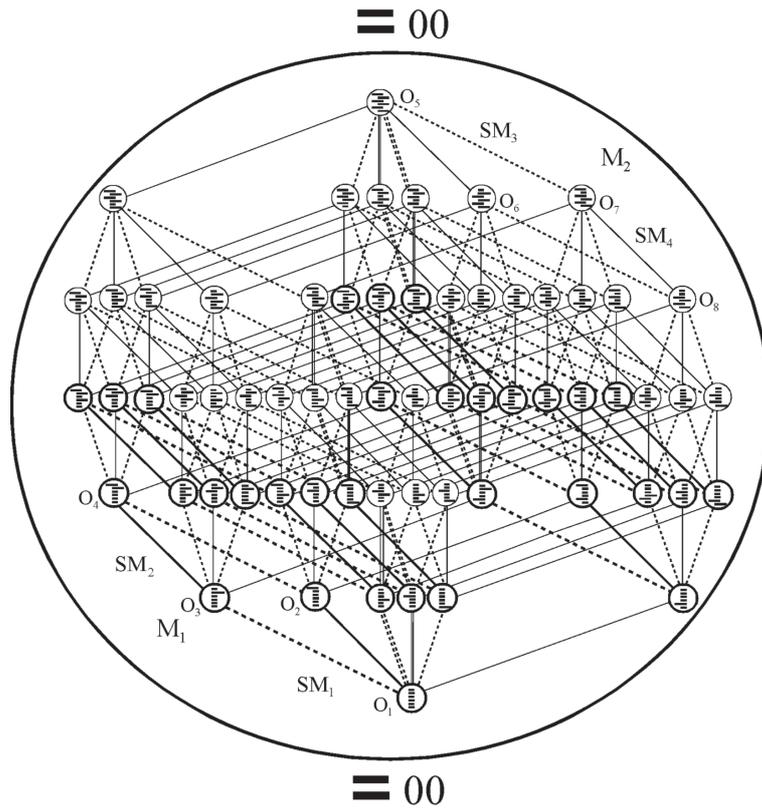


Рис. 2 Пространственное представление центральной части пентафрагментов в форме псевдогексаграмм на гиперкубе  $B^6$

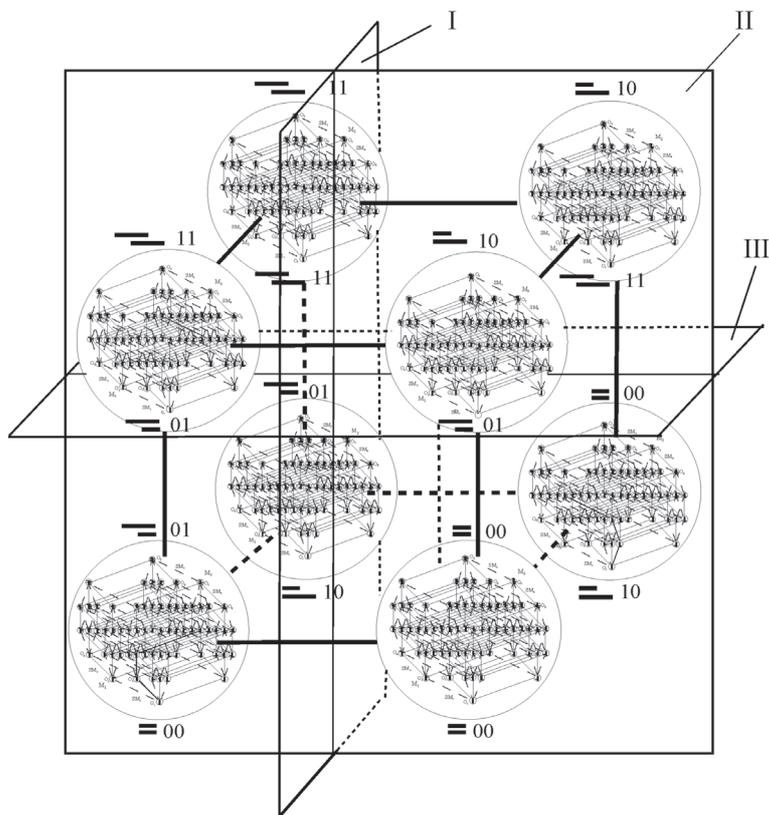


Рис. 3 Система пентафрагментов из восьми гиперкубов  $B^6$ , расположенная в вершинах трехмерного куба  $B^3$

исходного гиперкуба для плоскости *I* и *II* мы поместили гиперкуб с параметрами 10 – 01, т. е. при переходе через плоскость *III* происходит замыкание пентафрагмента в цикл с дублированием связи  $Q_i N \dots X_{i-4}$  и обе пары переменных синхронно изменяют значение на 1 бит ( $00 \leftarrow \rightarrow 10$  для верхней пары и  $00 \leftarrow \rightarrow 01$  — для нижней).

Гиперкуб с парой переменных 11 – 11 расположен в вершине слева от плоскости *I*, за плоскостью *II* и над плоскостью *III*. Переход через плоскость *I* сопровождается изменениями на 1 бит для верхней пары переменных ( $11 \leftarrow \rightarrow 10$ ), переход через плоскость *II* связан с изменениями в нижней паре переменных ( $11 \leftarrow \rightarrow 01$ ), а переход через плоскость *III* — с разрывом связи  $Q_i N \dots X_{i-4}$ , размыканием цикла и синхронными изменениями в обеих парах переменных ( $11 \leftarrow \rightarrow 01$ ,  $11 \leftarrow \rightarrow 10$ ).

Каждый гиперкуб  $B^6$  на полученной структуре связан с тремя другими, поэтому для них имеется по три альтернативных варианта однобитовых переходов. Таким образом, использование принципа однобитовых переходов позволило однозначно построить полную структуру всех 512 пентафрагментов для любых типов цепных полимеров, включая белки.

### 3. ПРИМЕНЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ ПЕНТАФРАГМЕНТОВ

#### 3.1. Анализ экспериментальных данных

В работе [2] были получены данные по содержанию различных типов пентафрагментов в выборке из 537 белковых структур. В целях более детального анализа этих данных на гиперкубах, соответствующих тому или иному подклассу (см. рис. 3), были отмечены те вершины, которые соответствуют видам пентафрагментов, максимально представленным в этих подклассах, причем ограничились лишь такими, которые найдены в количестве, как правило, 2000 и более. Исключение составляют подклассы 10-01 и 01-10, в которых, как можно судить по табл. 6 в работе [2], максимальное число фрагментов составляет 200–300. Результаты этой работы представлены на рис. 4. Анализ данных позволяет сделать следующие выводы.

Пентафрагменты, входящие в различные подклассы, формируют на соответствующих гиперкубах цепи (серии), связанные однобитовыми переходами (этим переходам соответствуют линии, связывающие вершины гиперкуба). Возможность

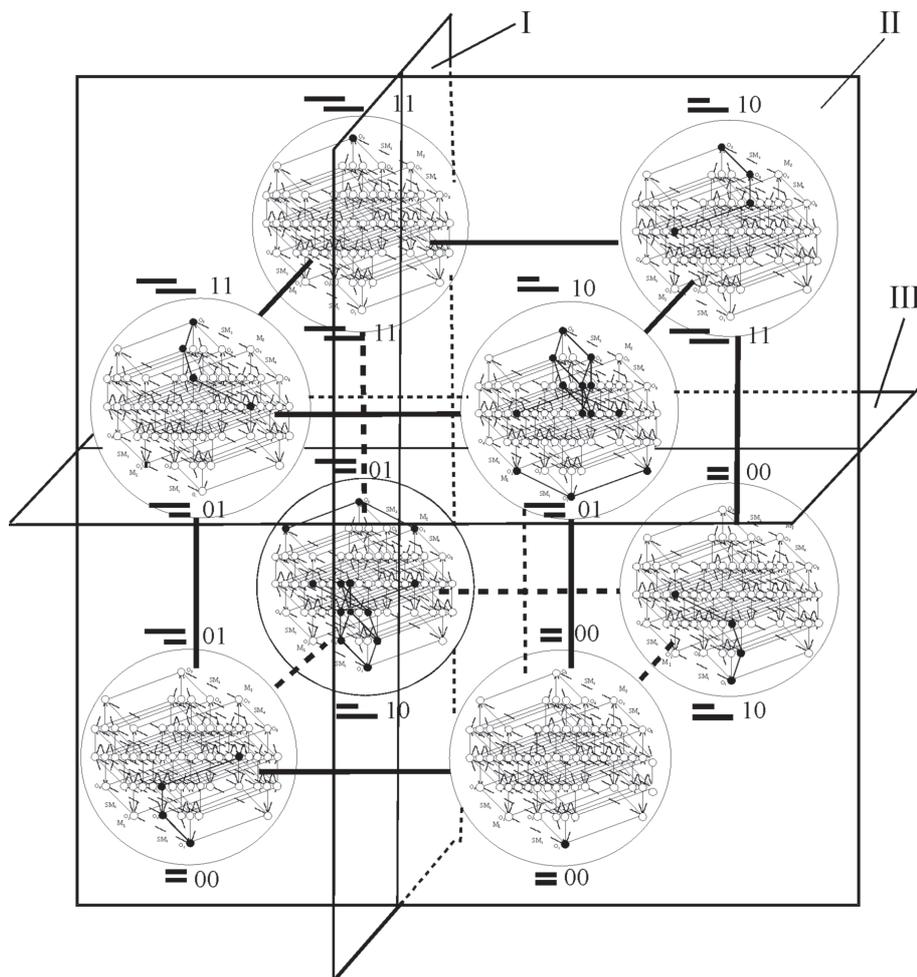


Рис. 4 Расположение пентафрагментов, присутствующих в каждом подклассе в максимальном количестве, на системе гиперкубов

образования таких цепей прослеживается практически на всех подклассах, кроме 00-00 и 11-11 (см. рис. 4). Следует, однако, отметить, что для подклассов 11-01 10-11, 00-10 и 01-00 характерной является лишь одна цепь, в то время как в подклассах 10-01 и 01-10, как видно на рис. 4, возможно несколько альтернативных серий.

В расположении цепей пентафрагментов проявляются элементы симметрии, которая наблюдается в подклассах 11-01 и 10-11, 00-10 и 01-00, и антисимметрии (см. введение), которая характерна для цепей подклассов, расположенных на противоположных вершинах куба  $V^3$ . На рис. 4 видно, что цепи фрагментов подклассов 10-11 и 01-00, а также 11-01 и 00-10 являются антисимметричными. Антисимметрия проявляется также для элементов подклассов 10-01 и 01-10, хотя, как мы отмечали, в них возможно образование нескольких альтернативных серий. Ответ на вопрос о природе цепей пентафрагментов был найден в процессе анализа формирования типичной  $\alpha$ -спирали на основе пентафрагментов.

### 3.2. Алгоритмы построения вторичных структур цепных полимеров на пространственной структуре пентафрагментов

**Выделение серий пентафрагментов.** В работе [2] был приведен конкретный пример типичной  $\alpha$ -спиральной структуры из файла 1a4i и выделения на его основе конкретных пентафрагментов. Обобщение типов связей для любого цепного полимера [2] позволило нам использовать этот пример в качестве основы для формализованного представления пентафрагментов, входящих в спиральный участок полимера. Для проведения анализа на системе гиперкубов эти фрагменты были представлены в форме ПГГ. Результаты этой работы приведены в табл. 2.

Как следует из табл. 2, в структуре спирали можно выделить: исходный неспиральный фрагмент (R1), две серии начальных фрагментов (B1 – B4, а также B5 – B7 и C1), центральную часть, содержащую повторяющийся фрагмент (C2), две серии терминальных фрагментов (C3, E1 – E3 и E4 – E7) и конечный неспиральный фрагмент (R1).

Каждый пентафрагмент, как это было сделано в работе [2], разделен на три части: начальную, включающую  $i$ -й  $\alpha$ -атом и его связи; центральную, содержащую  $i - 1 - i - 3$ -е  $\alpha$ -атомы и их связи, и конечную, включающую  $i - 4$ -й  $\alpha$ -атом и его связи. Бинарная нумерация  $i$ -го и  $i - 4$ -го атомов и их обозначения в виде ПГГ вынесены в заголовок каждой серии. Далее следуют сами серии пентафрагментов, представленные в виде трех вышеупомянутых частей. Рядом справа приведены их обозначения в виде ПГГ (см. п. 1).

Как нетрудно убедиться, в каждой серии связи  $i$ -го и  $i - 4$ -го атомов полностью идентичны. Раз-

личия касаются только центральной части фрагмента. Пентафрагменты, составляющие серию, на 80 % перекрываются и различаются лишь на один бит в центральной части фрагмента. Например, в серии 01-00 в центральном участке последовательно появляются связи 01 при атомах  $i - 1$  (B2),  $i - 2$  (B3),  $i - 3$  (B4). Это наглядно видно как на формальных фрагментах, так и, особенно, на ПГГ.

Как правило, в каждую серию входит по четыре пентафрагмента. При этом, как видно в табл. 2, центральная часть последнего пентафрагмента каждой серии полностью совпадает с центральной частью первого фрагмента новой серии. Обратим также внимание, что в центральной части пентафрагмента C2 может быть  $N$  повторяющихся элементов, а исходный и конечный участки представлены фрагментом R1.

**Перенос серий фрагментов на систему гиперкубов.** Применение ПГГ позволило легко и наглядно осуществить эту работу (рис. 5). За основу рисунков была взята система гиперкубов на  $V^3$  (см. рис. 3). Центральные участки каждого из фрагментов, представленных в табл. 2 в виде ПГГ, находили на соответствующем гиперкубе, выделяли черным цветом максимальной интенсивности и несколько увеличивали в размере. Кроме того, пентафрагменты, между которыми имеются однокбитовые переходы, соединяли линиями со стрелками.

На основе проведенного анализа были сделаны следующие наблюдения. Начальный и конечный фрагменты находятся на отдельном гиперкубе, обозначенном как 00-00. Количество пентафрагментов в серии на гиперкубе не превышает четырех. При этом по мере перемещения по гиперкубу  $i$ -я пара переменных последовательно перемещается в центральную часть пентафрагмента до полного ее заполнения. В результате после получения серии из четырех фрагментов дальнейшие возможности получения пентафрагментов данной серии исчерпываются.

При переходе на структуру следующего гиперкуба последний пентафрагмент предыдущей серии становится начальным в новой серии пентафрагментов с измененной первой или последней парой переменных, которая по мере перемещения по гиперкубу постепенно заполняет структуру центральной части пентафрагмента.

Для маршрутов серий наблюдаются элементы симметрии и антисимметрии. Так, маршрут пентафрагментов на гиперкубе 01-00 симметричен маршруту пентафрагментов на гиперкубе 00-10, а маршрут пентафрагментов на гиперкубе 11-01 — маршруту пентафрагментов на гиперкубе 10-11. В то же время антисимметрия маршрутов проявляется иначе: маршрут пентафрагментов на гиперкубе 01-00 является антисимметричным маршруту пентафрагментов на гиперкубе 10-11, тогда как маршрут пентафрагментов на гиперкубе 11-01

Таблица 2. Серии фрагментов типичного спирального участка цепного полимера

Исходный и конечный фрагменты на гиперкубе  $\equiv 00 - \equiv 00$

R1				R1	
$X_i$ $Q_i H$	$\equiv$			$X_i$ $Q_i H$	$\equiv$
$X_{i-1}$ $Q_{i-1} H$ $X_{i-2}$ $Q_{i-2} H$ $X_{i-3}$ $Q_{i-3} H$	$\equiv$ $\equiv$ $\equiv$ $\equiv$			$X_{i-1}$ $Q_{i-1} H$ $X_{i-2}$ $Q_{i-2} H$ $X_{i-3}$ $Q_{i-3} H$	$\equiv$ $\equiv$ $\equiv$ $\equiv$
$X_{i-4}$ $Q_{i-4} H$	$\equiv$			$X_{i-4}$ $Q_{i-4} H$	$\equiv$

Серия фрагментов на гиперкубе  $\equiv 01 - \equiv 00$

B1	B2	B3	B4
$Q_{i+4} H \dots X_i$ $Q_i H$	$\equiv$	$Q_{i+4} H \dots X_i$ $Q_i H$	$Q_{i+4} H \dots X_i$ $Q_i H$
$X_{i-1}$ $Q_{i-1} H$ $X_{i-2}$ $Q_{i-2} H$ $X_{i-3}$ $Q_{i-3} H$	$\equiv$ $\equiv$ $\equiv$ $\equiv$	$Q_{i+3} H \dots X_{i-1}$ $Q_{i-1} H$ $X_{i-2}$ $Q_{i-2} H$ $X_{i-3}$ $Q_{i-3} H$	$Q_{i+3} H \dots X_{i-1}$ $Q_{i-1} H$ $Q_{i+2} H \dots X_{i-2}$ $Q_{i-2} H$ $Q_{i+1} H \dots X_{i-3}$ $Q_{i-3} H$
$X_{i-4}$ $Q_{i-4} H$	$\equiv$	$X_{i-4}$ $Q_{i-4} H$	$X_{i-4}$ $Q_{i-4} H$

Серия фрагментов на гиперкубе  $\equiv 11 - \equiv 01$

B5	B6	B7	C1
$Q_{i+4} H \dots X_i$ $Q_i H \dots X_{i-4}$	$Q_{i+4} H \dots X_i$ $Q_i H \dots X_{i-4}$	$Q_{i+4} H \dots X_i$ $Q_i H \dots X_{i-4}$	$Q_{i+4} H \dots X_i$ $Q_i H \dots X_{i-4}$
$Q_{i+3} H \dots X_{i-1}$ $Q_{i+2} H \dots X_{i-2}$ $Q_{i+1} H \dots X_{i-3}$ $Q_{i-3} H$	$Q_{i+3} H \dots X_{i-1}$ $Q_{i-1} H \dots X_{i-5}$ $Q_{i+2} H \dots X_{i-2}$ $Q_{i+1} H \dots X_{i-3}$ $Q_{i-3} H$	$Q_{i+3} H \dots X_{i-1}$ $Q_{i-1} H \dots X_{i-5}$ $Q_{i+2} H \dots X_{i-2}$ $Q_{i+1} H \dots X_{i-3}$ $Q_{i-3} H$	$Q_{i+3} H \dots X_{i-1}$ $Q_{i-1} H \dots X_{i-5}$ $Q_{i+2} H \dots X_{i-2}$ $Q_{i+1} H \dots X_{i-3}$ $Q_{i-3} H \dots X_{i-7}$
$Q_i H \dots X_{i-4}$ $Q_{i-4} H$	$Q_i H \dots X_{i-4}$ $Q_{i-4} H$	$Q_i H \dots X_{i-4}$ $Q_{i-4} H$	$Q_i H \dots X_{i-4}$ $Q_{i-4} H$

Повторяющийся спиральный фрагмент на гиперкубе  $\equiv 11 - \equiv 11$

C2	C2	C2
$Q_{i+4} H \dots X_i$ $Q_i H \dots X_{i-4}$	$Q_{i+4} H \dots X_i$ $Q_i H \dots X_{i-4}$	$Q_{i+4} H \dots X_i$ $Q_i H \dots X_{i-4}$
$Q_{i+3} H \dots X_{i-1}$ $Q_{i+2} H \dots X_{i-2}$ $Q_{i+1} H \dots X_{i-3}$ $Q_{i-3} H \dots X_{i-7}$	$Q_{i+3} H \dots X_{i-1}$ $Q_{i-1} H \dots X_{i-5}$ $Q_{i+2} H \dots X_{i-2}$ $Q_{i+1} H \dots X_{i-3}$ $Q_{i-3} H \dots X_{i-7}$	$Q_{i+3} H \dots X_{i-1}$ $Q_{i-1} H \dots X_{i-5}$ $Q_{i+2} H \dots X_{i-2}$ $Q_{i+1} H \dots X_{i-3}$ $Q_{i-3} H \dots X_{i-7}$
$Q_i H \dots X_{i-4}$ $Q_{i-4} H \dots X_{i-8}$	$Q_i H \dots X_{i-4}$ $Q_{i-4} H \dots X_{i-8}$	$Q_i H \dots X_{i-4}$ $Q_{i-4} H \dots X_{i-8}$

Серия фрагментов на гиперкубе  $\equiv 10 - \equiv 11$ 

С3		Е1		Е2		Е3	
$X_i$ $Q_i H \dots X_{i-4}$	$\equiv$	$X_i$ $Q_i H \dots X_{i-4}$	$\equiv$	$X_i$ $Q_i H \dots X_{i-4}$	$\equiv$	$X_i$ $Q_i H \dots X_{i-4}$	$\equiv$
$Q_{i+3} H \dots X_{i-1}$ $Q_{i+2} H \dots X_{i-2}$ $Q_{i+1} H \dots X_{i-3}$	$\equiv$	$X_{i-1}$ $Q_{i-1} H \dots X_{i-5}$ $Q_{i+2} H \dots X_{i-2}$ $Q_{i+1} H \dots X_{i-3}$	$\equiv$	$X_{i-1}$ $Q_{i-1} H \dots X_{i-5}$ $X_{i-2}$ $Q_{i-2} H \dots X_{i-6}$ $Q_{i+1} H \dots X_{i-3}$	$\equiv$	$X_{i-1}$ $Q_{i-1} H \dots X_{i-5}$ $X_{i-2}$ $Q_{i-2} H \dots X_{i-6}$ $X_{i-3}$ $Q_{i-3} H \dots X_{i-7}$	$\equiv$
$Q_i H \dots X_{i-4}$	$\equiv$	$Q_i H \dots X_{i-4}$	$\equiv$	$Q_i H \dots X_{i-4}$	$\equiv$	$Q_i H \dots X_{i-4}$	$\equiv$

Серия фрагментов на гиперкубе  $\equiv 00 - \equiv 10$ 

Е4		Е5		Е6		Е7	
$X_i$ $Q_i H$	$\equiv$	$X_i$ $Q_i H$	$\equiv$	$X_i$ $Q_i H$	$\equiv$	$X_i$ $Q_i H$	$\equiv$
$X_{i-1}$ $Q_{i-1} H \dots X_{i-5}$ $X_{i-2}$ $Q_{i-2} H \dots X_{i-6}$ $X_{i-3}$ $Q_{i-3} H \dots X_{i-7}$	$\equiv$	$X_{i-1}$ $Q_{i-1} H$ $X_{i-2}$ $Q_{i-2} H \dots X_{i-6}$ $X_{i-3}$ $Q_{i-3} H \dots X_{i-7}$	$\equiv$	$X_{i-1}$ $Q_{i-1} H$ $X_{i-2}$ $Q_{i-2} H$ $X_{i-3}$ $Q_{i-3} H \dots X_{i-7}$	$\equiv$	$X_{i-1}$ $Q_{i-1} H$ $X_{i-2}$ $Q_{i-2} H$ $X_{i-3}$ $Q_{i-3} H$	$\equiv$
$X_{i-4}$ $Q_{i-4} H \dots X_{i-8}$	$\equiv$	$X_{i-4}$ $Q_{i-4} H \dots X_{i-8}$	$\equiv$	$X_{i-4}$ $Q_{i-4} H \dots X_{i-8}$	$\equiv$	$X_{i-4}$ $Q_{i-4} H \dots X_{i-8}$	$\equiv$

Конечный фрагмент на гиперкубе  $\equiv 00 - \equiv 00$  (см. исходный фрагмент)

антисимметричен маршруту пентафрагментов на гиперкубе 00-10. Симметрия и антисимметрия будут проявляться также в процессе преобразования соответствующих элементов маршрута.

Ряд отмеченных особенностей можно проследить и в табл. 2. Однако при переходе к системе гиперкубов появляется ряд дополнительных свойств.

Так, на каждом гиперкубе можно получить лишь одну серию связанных между собой пентафрагментов, имеющих общий начальный пентафрагмент. Это обусловлено тем, что заполнение центральной области пентафрагмента возможно на данном типе гиперкуба только парой переменных одного типа. Значит, возникающая на гиперкубе серия не имеет ветвлений.

Кроме того, поскольку, как мы упоминали в п. 2, при переходе от одного гиперкуба к другому имеются три альтернативных варианта для формирования новых серий, то все эти варианты могут быть реализованы на каждом из этапов серии. Если серия прервалась на каком-либо этапе, то образующийся фрагмент развивается по сокращенному сценарию.

Последние выводы означают, что рассмотренный пример спиральной структуры не исчерпыва-

ет всех возможных вариантов вторичных структур, которые могут быть получены с использованием системы гиперкубов. Данную ситуацию, связанную с наличием трех альтернативных вариантов и обусловленную возможностью переходов на другие гиперкубы, можно обозначить термином «тетрахотомия» (по аналогии с дихотомией), или «четырёхстороннее ветвление». Это создает условия для формирования новых серий структур как разного состава, так и разной длины. Детальный анализ вариантов может стать предметом специальной работы.

Сопоставление порядка расположения серий, полученного для типичной  $\alpha$ -спирали (см. рис. 5), с порядком расположения отдельных видов пентафрагментов в цепях (рис. 4) показывает, что в соответствующих гиперкубах они полностью совпадают. Таким образом, вопрос о природе цепей пентафрагментов, возникший (см. п. 3.1), при количественном анализе пентафрагментов в белках, решается однозначно: они относятся к отдельным этапам формирования  $\alpha$ -спиральных участков белков. Это не должно вызывать удивления, поскольку именно типичная  $\alpha$ -спираль является одним из наиболее распространенных элементов их вторичной структуры.

a)

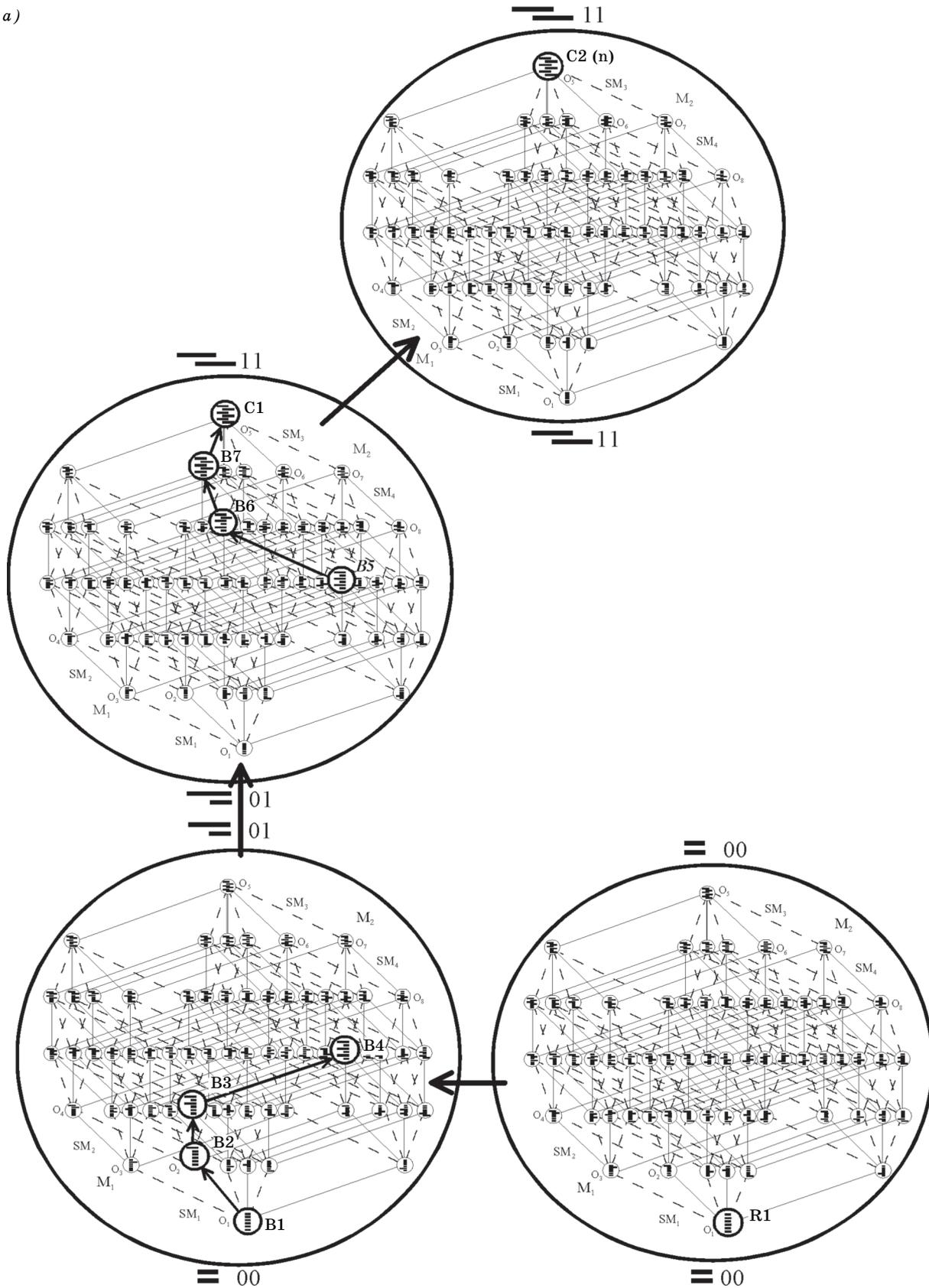


Рис. 5 | Перенос серий спирального участка цепного полимера на систему гиперкубов  $B^b$ : а — начальных, б — конечных

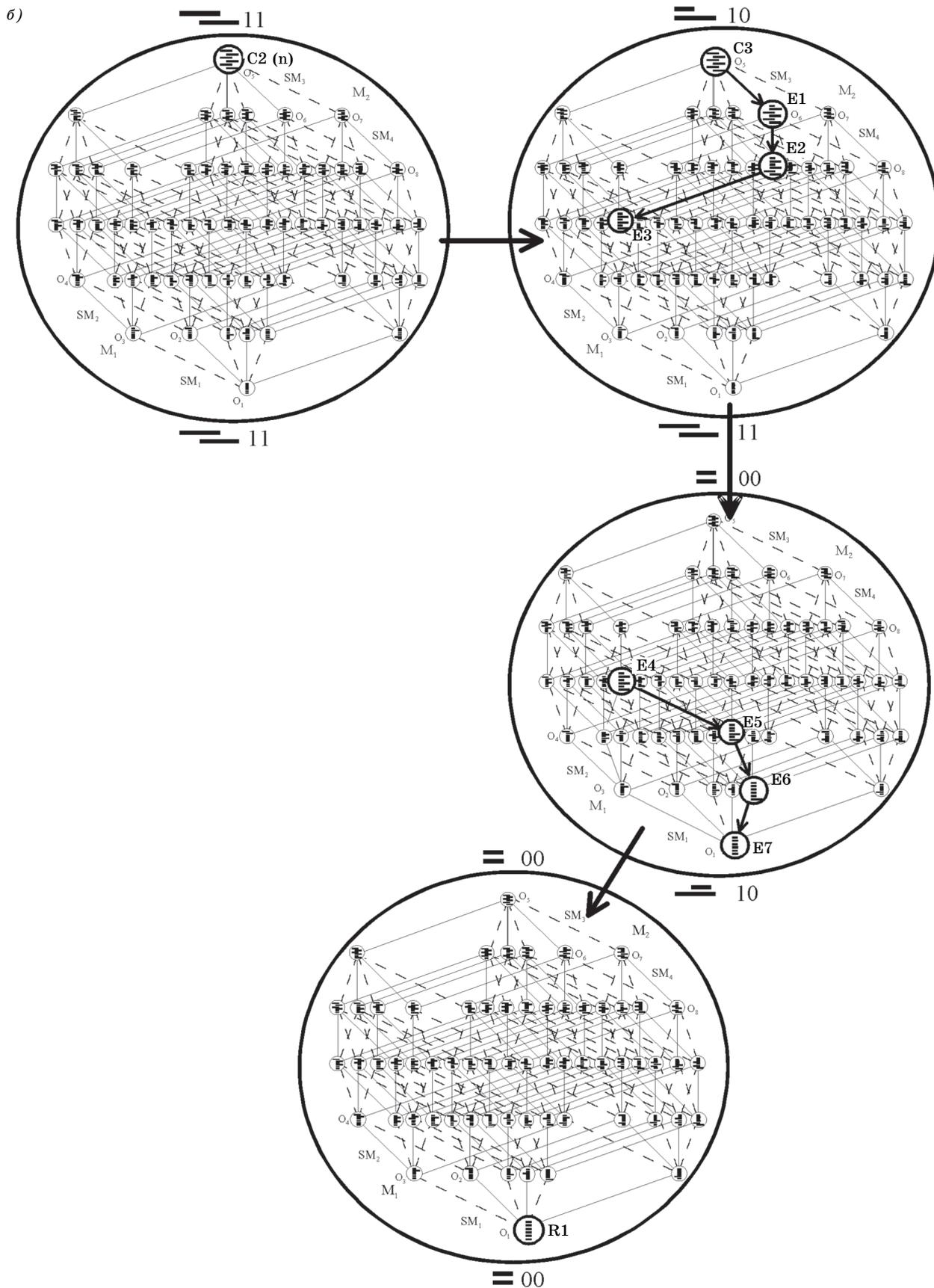


Рис. 5 Окончание

## Заключение

В данной статье показано, что связи центральной части пентафрагментов (пары переменных  $i - 1$ ,  $i - 2$ ,  $i - 3$ ) могут быть представлены в виде структуры, изоморфной булеву гиперкубу  $B^6$ . В результате работы была предложена пространственная структура системы пентафрагментов из восьми гиперкубов  $B^6$ , расположенных в вершинах трехмерного куба  $B^3$ , причем каждый из них связан с тремя другими однобитовыми переходами между  $i$ -й и  $i - 4$ -й парами переменных пентафрагментов. Показано, что данная структура может служить основой алгоритмов формирования вторичных структур цепных полимеров и, в частности, белков.

Однако полученные результаты не исчерпывают возможностей данного подхода. Во-первых, представляет интерес дальнейший анализ возможных алгоритмов формирования вторичных структур. Они, естественно, будут охватывать не только варианты  $\alpha$ -спиральных структур, но и складчатые  $\beta$ -структуры. Во-вторых, предложенные структуры, в общем виде описывающие процедуру формирования вторичных структур, никак не связаны с конкретными белковыми цепями, в которых они реализуются. Задача установления такой взаимосвязи является, на наш взгляд, центральной проблемой, решение которой может способствовать разработке конкретных методов отыскания и конструирования вторичных структур, как белков, так и цепных полимеров в целом. Наконец, в-третьих, предложенная система может иметь отношение и к другим, более высоким уровням построения цеп-

ных полимеров, например к формированию их третичной структуры. Исследование этого вопроса также представляет существенный теоретический и практический интерес. Наши дальнейшие исследования будут направлены на решение сформулированных задач.

Выражаю искреннюю благодарность д-ру техн. наук *В. В. Лучинину* за интерес и поддержку данного направления исследований.

## Литература

1. **Карасев В. А., Лучинин В. В.** Введение в конструирование бионических наносистем. М.: Физматлит, 2009. 464 с.
2. **Карасев В. А.** О принципах построения цепных полимеров. I. Система пентафрагментов. Биотехносфера. 2009, № 5. С. 7–17.
3. **Яблонский С. В.** Введение в дискретную математику. М.: Наука, 1986. 384 с.
4. **Карасев В. А., Лучинин В. В.** Проблемы создания искусственных бионических микро- и наносистем // Изв. вузов. Электроника. 1998. № 6. С. 5–15.
5. **Karasev V. A., Demchenko E. L., Stefanov V. E.** Topological coding of polymers and protein structure prediction // Chemical topology: applications and techniques / Ser. Math.Chem. D. Bonchev & D. Rouvray eds. New York; London; Paris: Gordon&Breach, 2000. Vol. 6. P. 295–345.
6. **Карасев В. А.** Генетический код: новые горизонты. СПб.: Тесса, 2003. 144 с.
7. **Петухов С. В.** Бипериодическая таблица генетического кода и число протонов. М.: Молодежный книжный центр, 2001. 258 с.
8. **Википедия** <http://ru.wikipedia.org/wiki/>.