

## ВЛИЯНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПЕПТИДНЫХ ГРУПП С ВОДОЙ НА $\beta$ -СТРУКТУРУ

А. В. Каява, В. И. Лим

Известно, что вода влияет на стабильность и структуру белков [1], однако, несмотря на существование различных подходов и расчетных схем [2—5], теория, учитывающая влияние воды на конформацию полипептидной цепи, еще далека от завершения. В данной работе использован новый подход к этой проблеме, который позволяет на качественном уровне по изменению параметров водородных связей между полипептидом и молекулами воды судить о влиянии водного окружения на конформацию полипептидной цепи. Стереохимический анализ, проведенный нами на атомных моделях СРК, проволочных моделях и ЭВМ, основан на следующей схеме взаимодействия воды и полипептида. Во-первых, считалось, что доноры и акцепторы водородных связей полипептида, не занятые во внутримолекулярных взаимодействиях, должны образовывать водородные связи с водой. Во-вторых, предполагалось, что молекулы воды, контактирующие с полипептидной цепью, стремятся образовать четыре тетраэдрически направленные водородные связи. Предлагаемая нами схема взаимодействия полипептидной цепи с водой хорошо согласуется с экспериментальными данными [6—11].

Основываясь на этой схеме, рассмотрим, как влияет вода на конформацию вытянутой полипептидной цепи, а также на конформацию антипараллельной двухцепочечной  $\beta$ -структуры.

Стереохимический анализ взаимодействия воды с вытянутой полипептидной цепью. Рассматриваемая нами вытянутая полипептидная цепь состоит из остатков с конформациями, принадлежащими нормально допустимой для остатков аланинового типа  $\beta$ -области карты Рамачандрана ( $-180^\circ < \varphi < -60^\circ$ ,  $90^\circ < \psi < 180^\circ$ ) [12]. Вода должна оказывать на  $\beta$ -конформацию полипептидной цепи большее влияние, чем на остальные стерически разрешенные конформации ( $\alpha$  и  $\alpha_L$ ), поскольку в пределах  $\beta$ -области внутрицепная конформационная энергия полипептида практически не изменяется [12], что означает повышенную чувствительность  $\beta$ -конформаций цепи к любым другим типам взаимодействия и, в частности, к взаимодействию с водой. Согласно нашей схеме, молекулы воды, окружающие полипептид, стремятся образовать четыре тетраэдрически направленные водородные связи. Данное стремление молекул воды удовлетворяется лишь в том случае, если взаимная ориентация водородных связей полипептида — вода совпадает с ориентацией водородных связей тетраэдрической структуры воды. При проведении стереохимического анализа конформация полипептидной цепи с такой ориентацией доноров и акцепторов водородной связи считалась энергетически наиболее выгодной по взаимодействию с водой. Учитывалось также то обстоятельство, что чем меньше расстояние между двумя донорами и(или) акцепторами водородной связи полипептида, тем сильнее влияет на конформацию цепи их взаимодействие с водой. Таким образом, на конформацию вытянутой полипептидной цепи основное влияние должно оказывать взаимодействие с водой самых близких пар доноров и акцепторов водородной связи:  $N_iH_i$ ,  $O_i'$  и  $N_{i+1}H_{i+1}$ ,  $O'_{i-1}$  (обозначения атомов см. на рис. 4). Проведенный на ЭВМ стереохимический анализ взаимодействия воды с  $N_iH_i$ ,  $O_i'$  и  $N_{i+1}H_{i+1}$ ,  $O'_{i-1}$  заключался в следующем. Данные пары доноров и акцепторов водородной связи могут принимать в  $\beta$ -области шесть ориентаций тетраэдрической структуры воды (рис. 1). Каждую из этих шести ориентаций сравнивали с ориентацией водородных связей  $NH \dots$  вода и  $O' \dots$  вода аминокислотного остатка, находящегося в анализируемой конформации. Затем выбирали иде-

альную ориентацию, наиболее совпадающую с анализируемой, и различие между этими ориентациями оценивали по искажению одной водородной связи (NH... вода) при другой (O'... вода) — неискаженной. Искажение водородной связи NH... вода определяли по отклонению угла HNO от нулевого значения и угла NOO от тетраэдрического значения (109°) (рис. 1). Длина водородных связей бралась равной 0,28 нм.

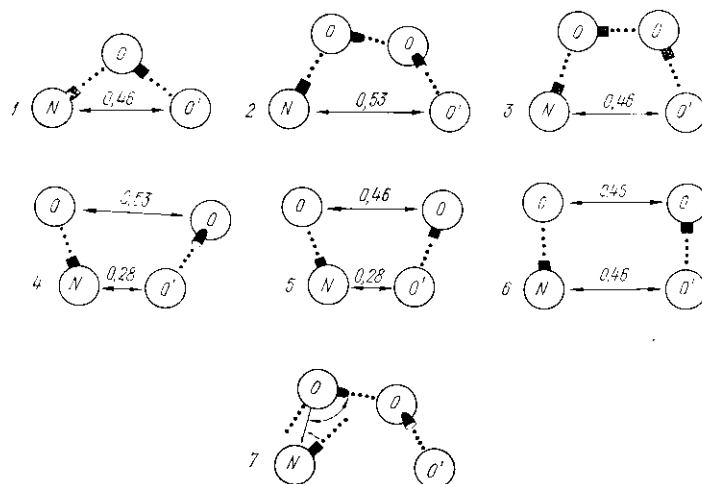


Рис. 1. Все возможные в пределах  $\beta$ -области ориентации идеальных водородных связей между  $N_iH_i$ ,  $O'_i$  ( $N_{i+1}H_{i+1}$ ,  $O'_{i-1}$ ) и молекулами тетраэдрической структуры воды (1-6) и углы HNO и NOO, используемые при оценке искажения водородной связи (7). O — атомы кислорода молекул воды; N и O' — атомы азота и кислорода полипептида. Черными стержнями обозначены связи NH и OH, а точками — водородные связи. Расстояния указаны в нм

Fig. 1. Ideal hydrogen bond orientations between  $N_iH_i$ ,  $O'_i$  ( $N_{i+1}H_{i+1}$ ,  $O'_{i-1}$ ) and the tetrahedral water structure possible in the  $\beta$ -region (1-6) and the angles HNO and NOO used for estimating distortion of the hydrogen bond (7). O — oxygen atoms of water molecules; N and O' — nitrogen and oxygen atoms of a polypeptide. Sticks are NH and OH bonds, dotted lines show hydrogen bonds

Стереохимический анализ показал, что основное влияние на конформацию вытянутой полипептидной цепи оказывает взаимодействие с водой пары  $N_iH_i$ ,  $O'_i$ . Оказалось, что об изменении взаимодействия  $N_iH_i$ ,  $O'_i$  с водой можно судить по изменению только одного параметра — угла HNO водородной связи NH... вода, поскольку второй параметр этой водородной связи — угол NOO в пределах  $\beta$ -области практически не изменяется. При конформациях полипептидной цепи со значениями торсионных углов  $-65^\circ < \varphi < -60^\circ$ ,  $90^\circ < \psi < 180^\circ$  ориентация водородных связей  $N_iH_i$ ... вода и  $O'_i$ ... вода совпадает с четвертым и пятым вариантами идеальной тетраэдрической ориентации. Однако при уменьшении значения угла  $\varphi$  увеличивается искажение связи  $N_iH_i$ ... вода (рис. 2, а). Что же касается взаимодействия второй пары доноров и акцепторов водородной связи  $N_{i+1}H_{i+1}$ ,  $O'_{i-1}$  с водой, то взаимные ориентации этих водородных связей в  $\beta$ -области существенно не отличаются от идеальных ориентаций ( $\angle HNO < 20^\circ$  или  $90^\circ < \angle NOO < 130^\circ$ ). Исключение составляют конформации полипептида из правой нижней части  $\beta$ -области (рис. 2, б), при которых водородная связь  $N_{i+1}H_{i+1}$ ... вода сильно искажается за счет отклонения угла HNO от нулевого значения при втором и третьем вариантах ориентации или за счет отклонения угла NOO' от тетраэдрического значения при первом варианте ориентации водородных связей. Следует отметить, что пара  $O'_i$ ,  $O'_{i-1}$ , так же как и пары  $N_iH_i$ ,  $O'_i$  и  $N_{i+1}H_{i+1}$ ,  $O'_{i-1}$ , образует с водой водородные связи, расположенные на расстоянии меньшем, чем радиус второй координационной сферы воды, однако эти взаимодействия слабо влияют на  $\beta$ -конформацию цепи, поскольку

ориентация водородных связей  $O_i' \dots \text{вода}$  и  $O'_{i-1} \dots \text{вода}$  практически не отличается от идеальных тетраэдрических ориентаций ( $\angle \text{HOO}' < 20^\circ$ ). Каждый остаток одиночной вытянутой полипептидной цепи взаимодействует с водой одновременно парой  $N_i H_i$ ,  $O_i'$  и парой  $N_{i+1} H_{i+1}$ ,  $O'_{i-1}$ , поэтому, если просуммировать результаты стереохимического анализа, то оказывается, что вода наилучшим образом взаимодействует с полипептидом, когда он имеет конформацию из правой

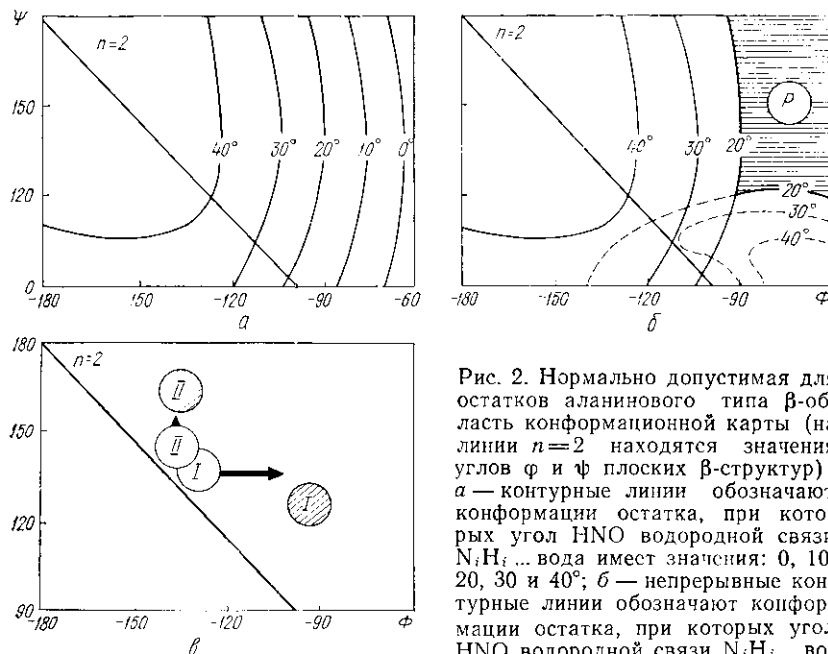


Рис. 2. Нормально допустимая для остатков аланинового типа  $\beta$ -область конформационной карты (на линии  $n=2$  находятся значения углов  $\varphi$  и  $\psi$  плоских  $\beta$ -структур):  $a$  — контурные линии обозначают конформации остатка, при которых угол  $\text{HNO}$  водородной связи  $N_i H_i \dots \text{вода}$  имеет значения: 0, 10, 20, 30 и  $40^\circ$ ;  $b$  — непрерывные контурные линии обозначают конформации остатка, при которых угол  $\text{HNO}$  водородной связи  $N_i H_i \dots \text{вода}$

отклоняется от нулевого значения на 20, 30 и  $40^\circ$ ; пунктирные контурные линии обозначают конформации остатка, при которых угол  $\text{HNO}$  или угол ( $109^\circ\text{-NOO}'$ ) водородной связи  $N_{i+1} H_{i+1} \dots \text{вода}$  отклоняется на 20, 30 и  $40^\circ$ ; в заштрихованной области пептидные группы одиночной вытянутой цепи наилучшим образом взаимодействуют с водой;  $P$  — полипролиновая конформация полипептидной цепи;  $v$  — белые кружки — конформации остатков типов I и II, оптимальные по внутри- и межцепным взаимодействиям; стрелками обозначены изменения конформаций остатков, обусловленные взаимодействием пептидных групп с водой; серые кружки — конформации остатков типов I и II, наблюдаемые в антипараллельных двухцепочечных  $\beta$ -структурах глобулярных белков [19]

Fig. 2. The normally allowed  $\beta$ -region for L-alanyl. The line  $n=2$  gives  $\varphi$ ,  $\psi$  values for two-fold ribbon structures:  $a$  — contour lines correspond to residue conformations with the angle  $\text{HNO}$  of a  $N_i H_i \dots \text{water}$  hydrogen bond equalled  $0^\circ$ , 10, 20, 30,  $40^\circ$ ;  $b$  — solid contour lines shown residue conformations with the angle  $\text{HNO}$  of a  $N_i H_i \dots \text{water}$  hydrogen bond equalled 20, 30,  $40^\circ$ . Broken contour lines correspond to a residue conformation with a  $N_{i+1} H_{i+1} \dots \text{water}$  hydrogen bond angle  $\text{HNO}$  or ( $109^\circ\text{-NOO}'$ ) equalled 20, 30,  $40^\circ$ ; the best peptide group-water interaction is observed in the shaded region;  $P$  — polyproline conformation;  $v$  — open circles show type I and II residue conformations corresponding to the minimum energy of intra- and interchain interactions; the arrows indicate alterations caused by the peptide group-water interaction; shaded circles — type I and II residue conformations observed in globular protein  $\beta$ -hairpins [19]

верхней части  $\beta$ -области, т. е. полипролиновую конформацию (рис. 2, б). Дальнейший стереохимический анализ на атомных моделях СРК и скелетных проволочных моделях позволил построить модель пространственной структуры полипептидной цепи в полипролиновой конформации с окружающими ее молекулами воды (рис. 3). Расположение молекул воды, взаимодействующих с полипептидом, было определено на атомных моделях СРК и проволочных моделях, исходя из принципа наименьшего искажения водородных связей всей системы. Из рис. 3 видно, что молекулы воды, взаимодействующие с пептидными группа-

ми, образуют вдоль полипептидной цепи непрерывную цепочку. Такое расположение молекул воды вокруг полипептида указывает на возможность стабилизации спиральной полипролиновой конформации водой. С другой стороны, полипептидная цепь, зафиксированная в полипролиновой конформации внутри- и (или) межцепными взаимодействиями, способствует образованию у поверхности цепи упорядоченной льдоподобной структуры воды. Гидрофобные боковые группы полипептида заключены в клатратные полусферы. Молекулы воды, участвующие в образовании этих клатратных структур, имеют искаженные

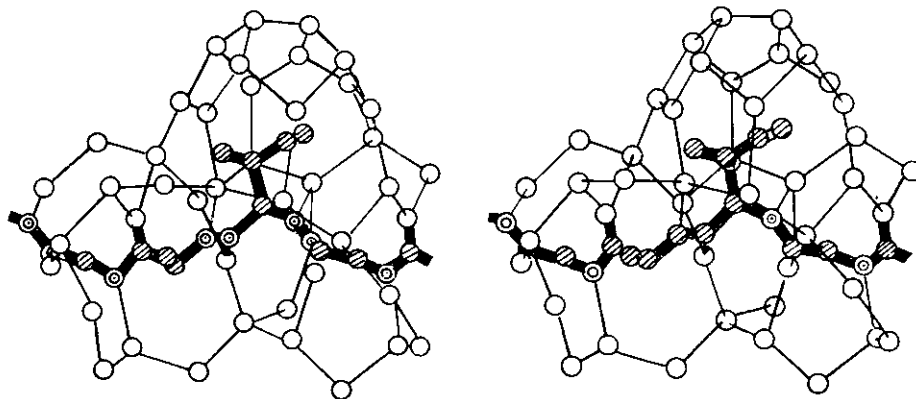


Рис. 3. Стереопара фрагмента -Gly-Ile-Ala-Gly- полипептидной цепи в полипролиновой конформации с окружающими его молекулами воды. Клатратная полусфера изображена только вокруг остатка изолейцина. Открытыми кружками обозначены атомы кислорода, заштрихованными кружками — атомы углерода и кружками, заполненными концентрическими окружностями, — атомы азота. Толстые и тонкие стержни — ковалентные и водородные связи соответственно

Fig. 3. Stereo drawing of the polypeptide fragment -Gly-Ile-Ala-Gly- in polyproline conformation with the surrounding water molecules. There is a clathrate half-sphere around the isoleucine residue. Open circles correspond to oxygen atoms, shaded circles — to carbon atoms, circles with circumferences — nitrogen atoms. Thick sticks are covalent bonds, thin sticks are hydrogen bonds

водородные связи. Гидрофильные остатки способны снимать напряжение клатратных структур, образуя с ними водородные связи. Искажение водородных связей клатратной полусферы практически не изменяется при изменении конформации основной цепи в  $\beta$ -области. Следовательно, взаимодействие воды с боковыми группами полипептидной цепи слабо влияет на  $\beta$ -конформацию полипептида.

Стереохимический анализ взаимодействия антипараллельной двухцепочечной  $\beta$ -структуры с водой. На конформацию вытянутой полипептидной цепи антипараллельной двухцепочечной  $\beta$ -структуры помимо внутрицепных взаимодействий существенное влияние оказывают межцепные взаимодействия. Конформационные расчеты показали, что оптимальные по внутри- и межцепным взаимодействиям конформации остатков антипараллельной двухцепочечной  $\beta$ -структуры имеют значения торсионных углов из области  $-150^\circ < \varphi < -120^\circ$ ,  $130^\circ < \psi < 170^\circ$  [13—15]. Рассмотрим, как изменится оптимальная по внутри- и межцепным взаимодействиям конформация  $\beta$ -структуры при учете ее взаимодействия с водой.

В составе антипараллельной двухцепочечной  $\beta$ -структуры соседние вдоль цепи аминокислотные остатки по-разному взаимодействуют с водой. Один остаток (типа I) взаимодействует с водой парой доноров и акцепторов водородной связи  $N_i H_i$ ,  $O'_i$ , другой (типа II) — парой  $N_{i+1} H_{i+1}$ ,  $O'_{i-1}$  (рис. 4). Из проведенного стереохимического анализа следует, что минимум энергии взаимодействия остатка типа I с водой располагается в области  $-65^\circ < \varphi < -60^\circ$ ,  $90^\circ < \psi < 180^\circ$ . Следовательно, вода стремится изменить оптимальную по внутри- и межцепным взаимодействиям  $\beta$ -конформацию остатка типа I, увеличивая значение

его угла  $\phi$ . Поскольку силы межцепного взаимодействия препятствуют этому процессу, то минимум полной энергии остатка типа I должен располагаться на конформационной карте между минимумом энергии внутри- и межцепных взаимодействий и минимумом энергии взаимодействия с водой. Влияние воды на конформацию остатка типа II осуществляется не непосредственно, а через соседний остаток типа I. Известно, что при увеличении угла  $\phi$  остатка типа I водородные связи между  $\beta$ -стрендами не искажаются лишь в том случае, если угол  $\psi$ ; остатка типа II тоже увеличивается [16—18]. Поэтому взаимодействие

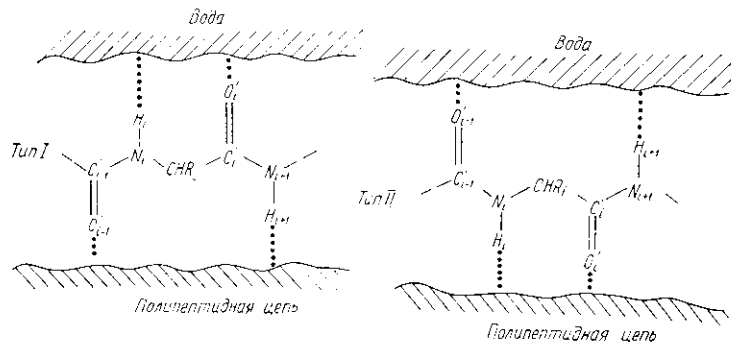


Рис. 4. Два типа расположения дипептида, находящегося в составе двухцепочечной  $\beta$ -структуры

Fig. 4. Two types of dipeptide unit arrangement in a two-stranded  $\beta$ -structure

остатка типа I с водой является причиной не только смещения вправо минимума конформационной энергии этого остатка, но и одновременного смещения вверх минимума конформационной энергии остатка II (рис. 2, в). На рис. 2 линия  $n=2$  обозначает множество конформаций плоских  $\beta$ -структур. Справа от линии  $n=2$  находятся конформации остатков правозакрученных  $\beta$ -структур, слева — левозакрученных. Чем дальше от линии плоских  $\beta$ -структур удалены значения торсионных углов  $\phi$  и  $\psi$  остатков, тем сильнее закручена образованная ими  $\beta$ -структура. Из рис. 2, в, видно, что в результате взаимодействия пептидных групп с водой положения наиболее вероятных значений углов  $\phi$  и  $\psi$  остатков антипараллельной двухцепочечной  $\beta$ -структуры перемещаются вправо от линии  $n=2$ , что означает увеличение правой закрученности  $\beta$ -структуры. При этом минимумы конформационной энергии остатков типа I и II расходятся друг от друга таким образом, что вдоль полипептидных цепей  $\beta$ -структуры должно появиться чередование аминокислотных остатков со значениями торсионных углов  $\phi_I = \phi'_I + \Delta\phi$ ;  $\psi_I \approx \psi'_I$ ,  $\phi_{II} \approx \phi'_{II}$ ,  $\psi_{II} = \psi'_{II} + \Delta\psi$  ( $\phi'_I$ ,  $\psi'_I$ ,  $\phi'_{II}$ ,  $\psi'_{II}$  — значения торсионных углов остатков типа I и II, оптимальные по внутри- и межцепным взаимодействиям,  $\Delta\phi$ ,  $\Delta\psi > 0$ ).

Результаты стереохимического анализа взаимодействия двухцепочечной  $\beta$ -структуры с водой находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Из анализа пространственных структур белков известно, что антипараллельные двухцепочечные  $\beta$ -структуры всегда имеют более сильную правую закрученность по сравнению с закрученностью, предсказываемой конформационными расчетами, учитывающими только внутри- и межцепные взаимодействия. Более того, известно, что вдоль полипептидных цепей этих  $\beta$ -структур наблюдается чередование остатков со средними значениями торсионных углов  $\phi_I = -95^\circ$ ,  $\psi_I = 125^\circ$  и  $\phi_{II} = -135^\circ$ ,  $\psi_{II} = 165^\circ$  [19]. Именно такой характер чередования конформаций предсказывает проведенный нами стереохимический анализ взаимодействия  $\beta$ -структуры с водой.

Полученные результаты относятся ко всем аминокислотным остаткам, за исключением пролина, у которого отсутствует NH-группа. Доноры и акцепторы боковых групп  $\beta$ -структуры практически не влияют

на взаимодействие воды с основной цепью, поскольку они за счет большого количества степеней свободы имеют возможность взаимодействовать с водой одинаково хорошо при любых конформациях цепи. Следует заметить, что двухцепочечная полиглициновая  $\beta$ -структура может образовывать право- и левозакрученную структуру с равной вероятностью из-за отсутствия у глицина асимметрического  $C_\alpha$ -атома. Все предыдущие рассуждения можно применить и к параллельной двухцепочечной  $\beta$ -структуре. Отличие между антипараллельной и параллельной  $\beta$ -структурами может быть лишь в степени скрученности, потому что параллельный  $\beta$ -лист более ограничен межцепными взаимодействиями, чем антипараллельный [13, 17, 18]. При увеличении числа  $\beta$ -стрендов влияние воды на конформацию  $\beta$ -структуры должно уменьшаться, поскольку с водой будут взаимодействовать только крайние полипептидные цепи. В этом случае, по-видимому, основное влияние на конформацию  $\beta$ -структуры будут оказывать внутри- и межцепные взаимодействия.

Таким образом, проведенный в данной работе стереохимический анализ взаимодействия полипептидной цепи с водой, основанный на предположении о том, что молекулы воды, контактирующие с полипептидом, стремятся образовать четыре тетраэдрические направленные водородные связи, позволяет нам сделать следующие выводы.

1. На конформацию полипептидной цепи в нормально допустимой для остатков аланинового типа  $\beta$ -области основное влияние оказывает взаимодействие воды с донорами и акцепторами пептидных групп. Взаимодействие боковых групп с водой практически не влияет на конформацию основной цепи.

2. Одиночная вытянутая полипептидная цепь наилучшим образом взаимодействует с водой, когда она имеет регулярную конформацию полипролиновой спирали.

3. Вода увеличивает правую закрученность двухцепочечной  $\beta$ -структуры, предсказываемую расчетами, которые учитывают только внутри- и межцепные взаимодействия. При увеличении правой закрученности конформация двухцепочечной  $\beta$ -структуры, наиболее вероятная по внутри- и межцепным взаимодействиям, расщепляется на две  $\beta$ -конформации, чередующиеся вдоль полипептидных цепей. Величина закрученности и характер чередования конформаций двухцепочечной  $\beta$ -структуры, вытекающие из проведенного стереохимического анализа, хорошо согласуются с данными, полученными из анализа пространственных структур глобулярных белков.

Авторы благодарят А. В. Ефимова за обсуждение результатов работы и ценные замечания.

#### EFFECT OF PEPTIDE GROUP-WATER INTERACTION ON $\beta$ -STRUCTURE CONFORMATION

*A. V. Kayava, V. I. Lim*

Institute of Protein Research,  
Academy of Sciences of the USSR, Pushchino, Moscow Region

#### S u m m a r y

An approach to estimate the effect of protein-solvent interactions on the polypeptide chain conformation is presented. The stereochemical analysis was based on the tendency of water molecules to form four hydrogen bonds with a tetrahedral orientation and was made with molecular models and computer calculations. It was shown that in the  $\beta$ -region of the conformational map the best polypeptide-water interaction takes place when the polypeptide chain has a polyproline conformation. We have shown that the right-handed twist of  $\beta$ -hairpins, determined by its intra- and interchain interactions, increases by virtue of the peptide group-water interaction. With an increase of the twist the most probable conformation of  $\beta$ -hairpins splits into two  $\beta$ -conformations, alternating along the  $\beta$ -strands. The  $\beta$ -structure conformation, predicted by our stereochemical analysis, agrees well with the  $\beta$ -structure conformations observed in globular proteins.

1. *Kunz I. D., Kauzmann W.* Hydration of proteins and polypeptides // *Adv. Protein Chem.*—1974.—28.—P. 239—346.
2. *Финкельштейн А. В.* Стереохимический анализ вторичной структуры полипептидной цепи при помощи пространственных моделей Курто. I. Разрешенные конформации дипептидов // *Молекуляр. биология.*—1976.—10, № 3.—С. 507—513.
3. *Hodes Z. I., Nemethy G., Scheraga H. A.* Model for the conformational analysis of hydrated peptides. Effect of hydration on the conformational stability of the terminally blocked residues of the 20 naturally occurring amino acids // *Biopolymers.*—1979.—18, N 7.—P. 1565—1610.
4. *Rossky P. J., Karplus M.* A model for the simulation of an aqueous dipeptide solution // *Ibid.*—N 4.—P. 825—854.
5. *Lee B., Richards F. M.* The interpretation of protein structures: estimation of static accessibility // *J. Mol. Biol.*—1971.—55, N 3.—P. 379—400.
6. *Eisenberg D., Kauzmann W.* The structure and properties of water.—London: Oxford Univ. press, 1969.—296 p.
7. *Drost-Hansen W.* Structure and properties of water at biological interfaces.—New York: Acad. press, 1971.—184 p.
8. *Water structure in a protein crystal: rubredoxin at 1,2 Å resolution / K. D. Watenpaugh, T. N. Margulis, L. C. Sieker, L. H. Jensen // J. Mol. Biol.—1978.—122, N 2.—P. 175—190.*
9. *Sakabe N., Sakabe K., Sasaki K.* Hydrogen atoms and hydrogen bonding in rhombohedral 2 Zn insulin crystals by X-ray analysis at 1,2 Å resolution // *Structural studies on molecules of biological interest.*—Oxford: Clarendon press, 1981.—P. 509—526.
10. *Blake C. C. F., Pulford W. C. A., Artymiuk P. J.* X-ray studies of water in crystals of lysozyme // *J. Mol. Biol.*—1983.—167, N 3.—P. 693—723.
11. *Чиргадзе Ю. Н., Шеголева Т. Ю.* Гидратация полипептидной цепи рубредоксина по данным пространственной структуры // *Молекуляр. биология.*—1984.—18, № 4.—С. 994—1000.
12. *Ramachandran G. N.* Conformation of polypeptides and proteins // *Peptides, polypeptides and proteins.*—New York: Wiley Interscience, 1974.—P. 14—34.
13. *Алексаиян В. И., Скворцов А. М.* Расчет регулярной  $\beta$ -структуры полипептидов и свобода внутреннего вращения в плоской антипараллельной  $\beta$ -структуре // *Молекуляр. биология.*—1974.—8, № 2.—С. 182—189.
14. *Raghavendra K., Sasisekharan V.* Conformational analysis of the right-hand twisted antiparallel  $\beta$ -structure // *Int. J. Peptide and Protein Res.*—1979.—14, N 4.—P. 326—338.
15. *Structure of  $\beta$ -sheets. Origin of the right-handed twist and of the increased stability of antiparallel over parallel sheets / K.-C. Chou, M. Pottle, G. Nemethy et al. // J. Mol. Biol.—1982.—162, N 1.—P. 89—112.*
16. *Nishikawa K., Scheraga H. A.* Geometrical criteria for formation of coiled-coil structures of polypeptide chains // *Macromolecules.*—1976.—9, N 3.—P. 395—407.
17. *Salemme F. R., Weatherford D. W.* Conformational and geometrical properties of  $\beta$ -sheets in proteins. 1. Parallel  $\beta$ -sheets // *J. Mol. Biol.*—1981.—146, N 1.—P. 101—117.
18. *Salemme F. R., Weatherford D. W.* Conformational and geometrical properties of  $\beta$ -sheets in proteins. 2. Antiparallel and mixed  $\beta$ -sheets // *Ibid.*—P. 119—141.
19. *Chothia C.* Coiling of  $\beta$ -pleated sheets // *Ibid.*—1983.—163, N 1.—P. 107—117.

Ин-т белка АН СССР, Пушкино

Получено 27.08.86

УДК 577.323.5

## ВЛИЯНИЕ ОБЪЕМНЫХ ЭФФЕКТОВ НА ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОЛЬЦЕВЫХ ДНК \*

К. В. Кленни, А. В. Вологодский, В. В. Аншелевич,  
А. М. Дыхне, М. Д. Франк-Каменецкий

**Введение.** Для описания статистических свойств двунитевых молекул ДНК часто используется модель бесконечно тонкой полимерной цепи. Долгое время такая модель представлялась достаточно хорошим приближением, по крайней мере в условиях высокой ионной силы раствора, поскольку длина статистического сегмента двойной спирали ДНК почти на два порядка превышает ее геометрический диаметр. Однако высокая линейная плотность отрицательных зарядов на ДНК

\* Представлена членом редколлегии В. И. Ивановым.