

УДК 539.196.3+539.6+541.572.7

В. М. АСЛАНЯН, В. Ф. МОРОЗОВ

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ ПОТЕНЦИАЛ МОРЗЕ И КОНФОРМАЦИОННЫЕ РАСЧЕТЫ

Предложен модифицированный потенциал Морзе для описания межмолекулярных взаимодействий в виде

$$E(r) = \varepsilon \left\{ 0,1 \exp \left[\frac{2,6 \left(1 - \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \right)}{(1 - \sigma^2)} \right] - 1,1 \exp \left[1,2 \left(1 - \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \right) \right] \right\},$$

где ε и r_0 равновесные энергии и расстояния, а σ определяется суммой радиусов жестких сфер. Показано, что предложенный потенциал описывает известные в литературе потенциалы 6—12 и 6- \exp . При расчетах конформационной энергии может быть использован матричный формализм.

Как известно, конформационный статистический интеграл имеет вид [1]

$$z = \int_{\{\varphi\}} e^{-\frac{E\{\varphi\}}{kT}} d\{\varphi\}, \quad (1)$$

где интегрирование ведется по всем независимым конформационным параметрам и в приближении постоянства длин связей и валентных углов сводится к интегрированию по независимым торсионным углам. Для определения зависимости энергии $E\{\varphi\}$ от набора торсионных углов необходимо задание энергии взаимодействия валентно несвязанных атомов. Обычно для процедуры конформационного анализа используются потенциалы 6—12 или 6— \exp с тем или иным способом параметризации [2]. Потенциалы выражаются через расстояния r_{ik} между взаимодействующими i -м и k -м атомами. Для определения явного вида зависимости $E\{\varphi\}$ можно воспользоваться матричным формализмом [3]

$$r_{ik}^2 = J^* \prod_{j=1}^k M_j J, \quad (2)$$

где J^* и J —стандартные вектор-строка и вектор-столбец соответственно, а M_j —производящие матрицы, зависящие только от параметров j -й повторяющейся единицы, включающих в себя параметры длин валентных связей валентных и торсионных углов. Таким образом, величиной, характеризующей межатомные расстояния, является r_{ik} . Для унификации конформационных расчетов весьма удобным является однотипное описание притягивающей и отталкивающей частей потенциала меж-

молекулярных взаимодействий. Для этой цели нами вводится модифицированный потенциал Морзе (МПМ) в виде

$$E(r^2) = \epsilon \left[\frac{\alpha_1}{\alpha_2 - \alpha_1} e^{\alpha_2(1-x^2)} - \frac{\alpha_2}{\alpha_1 - \alpha_2} e^{\alpha_1(1-x^2)} \right], \quad (3)$$

где $x^2 = r^2/r_0^2$; ϵ и r_0 — равновесные энергии и расстояния, а α_1 и α_2 — эмпирические параметры, позволяющие аппроксимировать известные в литературе потенциалы предлагаемым нами МПМ. Для конкретизации α_1 и α_2 введем величину $\sigma^2 = r_1^2/r_0^2$, где r_1 — расстояние, соответствующее условию $E(r_1) = 0$. Известно [4], что при уменьшении расстояния, начиная с r_1 , энергия межмолекулярных взаимодействий резко возрастает. Поэтому величина r_1 может трактоваться как сумма радиусов жестких сфер. Для определения другого эмпирического параметра потребуем, чтобы на больших расстояниях ($1,5 r_0 \leq r \leq 2,5 r_0$) притягивающая часть МПМ аппроксимировалась зависимостью $E(r) \sim \frac{1}{r^6}$. Таким образом, определенные эмпирические параметры α_1 и α_2 приводят к следующему виду для выражения (3):

$$f(x) = E(r/r_0)/\epsilon = 0,1 \exp[2,6(1-x^2)/(1-\sigma^2)] - 1,1 \exp[1,2(1-x^2)]. \quad (4)$$

Сопоставление этого выражения с известными потенциалами-источниками Скотта-Шераги, Скотта-Шераги-Рамачандрана-Венкатачалама-Кримма и Дашевского [2] показали, что в интервалах $0,7 \leq x \leq 1,8$ МПМ отклоняется от потенциала-источника не более, чем на 5%. Поведение МПМ вне данного интервала более резкое, чем для потенциала-источника, т. е. при уменьшении расстояния он резко возрастает, а при увеличении — резко стремится к нулю. Тем не менее для конформационных расчетов области $x < 0,7$ и $x > 1,8$ не являются существенными. Область $x < 0,7$ является областью больших энергий и пренебрежительно малых статвесов, и, следовательно, точное поведение функции в этой области не является существенным. Область же $x > 1,8$ есть область стремления к нулю и может лишь изменить множитель при статистическом интеграле.

Таким образом, МПМ на расстояниях, существенных для конформационного анализа, хорошо аппроксимирует потенциалы-источники, единообразно описывает притяжение и отталкивание, содержит в себе величину r_1^2 , для которой может быть применен универсальный матричный формализм расчетов координат.

*Кафедра молекулярной
физики и биофизики*

Поступило 25.06.1984

ЛИТЕРАТУРА

1. Бирштейн Т. М., Птицын О. Б. Конформации макромолекул. М.: Наука, 1964.
2. Полозов Р. В. Метод полуэмпирического силового поля в конформационном расчете биополимеров. М.: Наука, 1981.
3. Флори П. Статистическая механика цепных молекул. М.: Мир, 1971.
4. Дашевский В. Г. Конформации органических молекул. М.: Химия, 1974.

Վ. Մ. ԱՍԼԱՆՅԱՆ, Վ. Ֆ. ՄՈՐՈԶՈՎ

ՄՈՐՁԵԻ ՄՈԴԻՖԻԿԱՑՎԱԾ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼԸ ԵՎ
ԿՈՆՖՈՐՄԱՑԻՈՆ ՀԱՇՎԱՐԿՆԵՐ

Ա մ փ ո փ ու մ

Առաջարկված է Մորզեի մոդիֆիկացված պոտենցիալ հետևյալ տեսքով.

$$E(r) = \varepsilon \left\{ 0,1 \exp \left[\frac{2,6 \left(1 - \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \right)}{(1-\sigma^2)} \right] - 1,1 \exp \left[1,2 \left(1 - \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \right) \right] \right\},$$

որտեղ ε -ը և Z_0 -ն համապատասխանաբար հավասարակշռված էներգիան և հեռավորությունն են, իսկ σ -ն՝ կոշտ գնդերի շառավիղների գումարը:

Ցույց է տրված, որ առաջարկված պոտենցիալը նկարագրում է գրակա նությունից հայտնի $6-12$ և $6-\exp$ պոտենցիալները: Կոնֆորմացիոն էներգիայի հաշվարկի համար կարելի է օգտագործել մատրիցային ֆորմալիզմը: