

УДК 541.64:539.199

## КОНФОРМАЦИЯ ИЗОЛИРОВАННОЙ МАКРОМОЛЕКУЛЫ ХИТИНА

*Елагин А. Л., Перцин А. И.*

Минимизацией полной энергии спиральной макромолекулы хитина как функции независимых конформационных параметров найдены оптимальные конформации изолированной макромолекулы. Энергия определена методом атом-атомных потенциалов. Проблема построения регулярной спирали решена с помощью специального алгоритма сопряжения элементарных звеньев линейного полимера в спираль заданной симметрии. Наиболее устойчивая конформация характеризуется наличием водородной связи  $O_3'-H \dots O_5$ ,  $O_6'-H \dots N_2$  и  $O_6'-H \dots O_1$ . Рассчитанное значение периода повторяемости вдоль оси спиральной макромолекулы хорошо согласуется с величиной, полученной экспериментально.

Хитин — линейный полисахарид, состоящий из остатков 2-ацетамидо-2-дезокси-D-глюкозы ( $N$ -ацетилглюкозамина), соединенных  $\beta$ -(1 $\rightarrow$ 4)-гликозидными связями. Этот аминополисахарид (один из наиболее распространенных в природе) служит основным компонентом наружного скелета ракообразных, насекомых и оболочек некоторых грибов [1]. Известны три полиморфные модификации хитина —  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  [2]. Хотя для  $\alpha$ - [3—5] и  $\beta$ -модификаций [6—8] выполнены довольно подробные рентгеноструктурные исследования, проблема строения кристаллических областей хитина в его различных полиморфных модификациях не может считаться решенной, так как, во-первых, предложенные структурные модели часто не согласуются между собой, а, во-вторых,  $\gamma$ -модификация изучена в значительно меньшей степени, чем  $\alpha$  и  $\beta$ .

Прямое экспериментальное определение строения кристаллических областей высокомолекулярных соединений затруднено из-за сложности интерпретации картин рентгеновской дифракции. Поэтому для установления структуры линейного полимера в кристаллическом состоянии обычно прежде всего задаются моделью макромолекулы, а затем уточняют структуру, используя экспериментально полученные интенсивности рефлексов. При этом часто привлекают дополнительные данные (на качественном уровне), например сведения о характере водородных связей в структуре, о запрещенных областях значений уточняемых параметров (из-за возникновения укороченных контактов) и т. п. Именно таким образом были построены структурные модели  $\alpha$ - и  $\beta$ -модификаций хитина [4—6]. При этом длины связей и валентные углы в мономерных звеньях находили усреднением структурных данных по моно- и дисахаридам, а конформацию основной цепи выбирали исходя из экспериментально найденных типа симметрии спиральной макромолекулы и периода идентичности вдоль оси волокна и не варьировали в ходе расчетов. Серьезный недостаток такого подхода — отсутствие энергетического критерия для оценки относительной устойчивости той или иной возможной конформации или упаковки.

Настоящей работой мы начинаем исследования, цель которых состоит в определении кристаллической и молекулярной структур хитина и некоторых его производных в различных модификациях с помощью метода атом-атомных потенциалов.

В 1959 г. Натта и Коррадини [9] выдвинули основные принципы геометрической организации стереорегулярных макромолекул. Один из этих принципов гласит, что конформация полимерной цепи в кристалле приблизительно соответствует одному из минимумов потенциальной энергии изолированной цепи. Таким образом, можно предположить, что влияние кристаллических межмолекулярных сил скажется лишь на выборе одного из локальных минимумов на энергетической поверхности изолированной

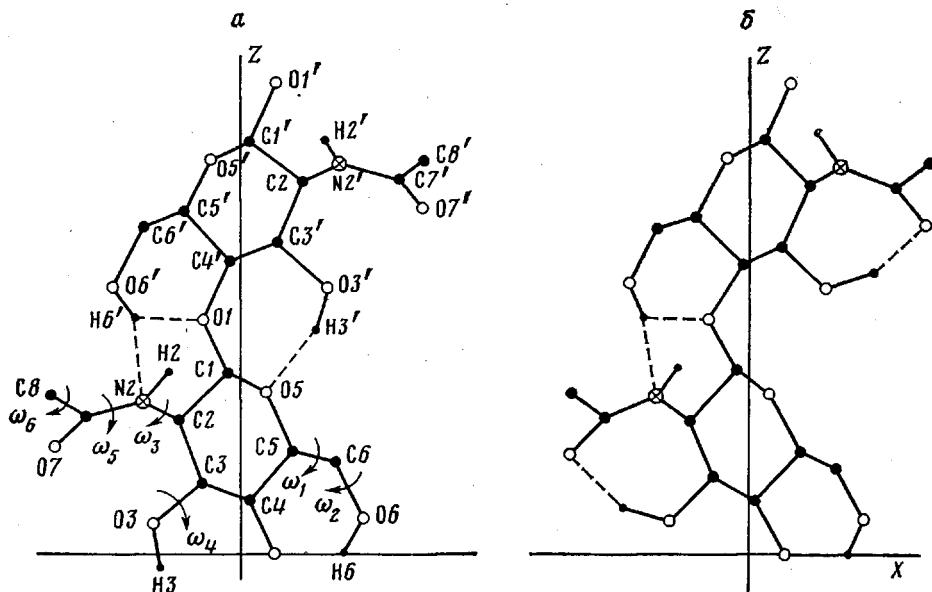


Рис. 1. Проекции устойчивых конформаций A1 (а) и A2 (б) макромолекулы хитина.  
Стрелками показаны варьируемые торсионные углы

макромолекулы. Вследствие этого имеет смысл начать исследования с расчета структуры изолированной макромолекулы хитина. Цель такого расчета — выявление локальных минимумов на энергетической поверхности макромолекулы, т. е. тех опорных точек, из которых в дальнейшем будет проводиться поиск оптимальной укладки молекул в кристалле.

Энергия напряжения  $U_{str}$  макромолекул хитина в данной работе была представлена в виде суммы следующих компонентов:

$$U_{str} = U_{nb} + U_t + U_v + U_H,$$

где  $U_{nb}$  — энергия отталкивания и дисперсионного притяжения, вычислявшаяся с помощью потенциала «б-эксп» (параметры потенциальных функций невалентных взаимодействий были взяты из табл. 2,4 работы [10]; для взаимодействий с участием атомов разных сортов параметры потенциалов рассчитывали по предложенным Дашевским в работе [10] комбинационным правилам);  $U_v$  — энергия деформации валентных углов (силовую константу деформации валентного угла при гликозидном атome кислорода принимали равной 273 кДж/моль, а идеальное значение угла — 90°);  $U_t$  — энергия деформации торсионных углов (торсионную энергию углов поворота вокруг связей С—С и С—О в глюкопиранозном кольце и мостике вычисляли по формуле  $U_t = U_0 / 2(1 + \cos 3\phi)$  с параметром  $U_0 = 1,39$  и  $1,51$  кДж/моль в расчете на один двугранный угол [10]; для оценки  $U_t$  аминоацетильной группы применяли торсионные потенциалы, используемые при конформационных расчетах в пептидах [10]);  $U_H$  — энергия водородных связей.

В структуре хитина возможно образование водородных связей трех типов: О—Н...О, N—H...O и O—H...N. Для расчета энергии этих взаимодействий использовали потенциальную функцию Морзе [10]. Параметры потенциалов для первых двух типов водородных связей были взяты из работ [11, 12], энергии диссоциации этих связей равны 23,1 и 16,8 кДж/моль соответственно. Для третьего типа Н-связи модельный потенциал отсутствует, поэтому энергия диссоциации связи О—Н...N (29,4 кДж/моль) была задана в соответствии с последними неэмпирическими квантовохимическими расчетами комплексов, образованных малыми молекулами [13]. В пользу такого решения свидетельствует хорошее согласование оценок энергий диссоциации связей O—H...O и N—H...O, получающихся в результате подобного расчета, со значениями, использованными в работах [11, 12]. Величина 29,4 кДж/моль представляется нам несколько завышенной и должна рассматриваться как верхнее допустимое значение для энергии диссоциации. Это обстоятельство необходимо учитывать при анализе устойчивых конформаций спиральной макромолекулы хитина. Величина равновесного расстояния Н...N, равная 1,9 Å, была принята на основании нейтронографических данных.

Конформацию глюкопиранозного цикла в ходе расчетов считали неизменной. Значения длин связей, валентных и торсионных углов цикла были заимствованы из работы Арнотта и Скотта [14], а для аминоацетильной группы были взяты общепринятые геометрические параметры пептидной связи [15]. В мономерном звене варьировали шесть торсионных углов, задающих ориентацию оксиметиленовой  $\phi$ ,

гидроксильных  $\omega_2$ ,  $\omega_4$ , аминоацетильной  $\omega_3$ , ацетильной  $\omega_5$  и метильной  $\omega_6$  группы (рис. 1). Для всех торсионных углов использовали систему отсчета, принятую в работе [16].

Проблема построения регулярной спирали в ходе минимизации энергии требует особого внимания. Существовавшие до недавнего времени алгоритмы построения спиральных макромолекул содержали серьезные недостатки. Так, Шерага [17] использовал уравнения Сугеты и Мизавы [18], связывающие параметры спирали (шаг спирали, угол закрутки  $\alpha$  и расстояния от атомов до оси спирали  $\rho_i$ ), с внутренними геометрическими параметрами макромолекулы (длинами связей, валентными и торсионными углами). Однако при расчете кристаллической структуры полимера из эксперимента известны шаг спирали и угол закрутки, а интерес представляют именно значения некоторых внутренних геометрических параметров. Из уравнений же, полученных в работе [18], нельзя явно выразить внутренние геометрические параметры через параметры спирали. Поэтому приходится подбирать решение методом последовательных приближений, т. е. вводить итерационную процедуру, что должно резко ухудшать сходимость при минимизации.

Алгоритм построения спирали, использованный в настоящей работе, основан на предположении, что полимерная цепь может быть разбита на ряд идентичных звеньев, узлами соединения которых являются точки (атомы). Таким образом, алгоритм применим к любым одномерным полимерам, исключая лестничные. На рис. 2 изображены два последовательных узла, соединения  $O_m$  и  $O_m'$ . Вектор  $a = O_m O_m'$  является функцией только внутренних конформационных параметров звена. Для хитина при выборе в качестве узлов соединения атомов  $O_1$ ,  $O_1'$  (рис. 1) и т. д.  $a$  — постоянный вектор.

Для исключения трансляционных и ориентационных степеней свободы одномерного звена как целого удобно проводить вычисления координат атомов звена в локальной системе координат. На рис. 2 показана ось  $X_m$  этой системы координат. При построении спирали основная сложность состоит в нахождении положения оси спирали в пространстве. Как видно из рис. 2, это положение может быть однозначно задано длиной радиус-вектора  $\rho$  и вектором  $h$ . При заданном шаге спирали  $\rho$  легко

находится по формуле  $\rho = \sqrt{a^2 - h^2} / 2(1 - \cos \alpha)$ , где  $a = |a|$ ,  $h = |h|$  и  $\alpha$  — угол закрутки спирали ( $180^\circ$  для хитина).

Очевидно, что знания величины вектора  $a$  недостаточно для определения конформации спирали. Действительно, для любого значения  $a$  можно построить бесконечное множество конформаций, отличающихся по поворотом вокруг вектора  $a$ . Каждой из таких конформаций соответствует некоторый угол  $\chi$ , образуемый осью  $X_m$  и радиус-вектором  $\rho$ . Таким образом, для однозначного описания спирали необходимо введение нового независимого параметра  $\chi$ . Легко показать, что, задав значения  $\chi$  и  $h$ , можно построить спираль. Действительно, по углам  $\chi$  и  $\eta = \arccos [\rho(1 - \cos \alpha)/a]$  и векторам  $a$  и  $X_m = \{1, 0, 0\}$  строится вектор  $\rho$ . Далее по углам  $\theta = \arccos(h/a)$  и  $d = 90^\circ$  и векторам  $\rho$  и  $a$  строится искомый вектор  $h$ . После нахождения положения в пространстве точки  $O_h$  и вектора оси спирали  $h$  удобно перейти в цилиндрическую систему координат  $O_h X_h Y_h Z_h$ . В этой системе положения атомов второго, третьего и следующих мономерных звеньев легко находятся поворотом исходного звена вокруг оси  $Z_h$  на угол  $\alpha$  и смещением вдоль оси  $Z_h$  на трансляцию  $h$ .

Задание  $h$  и  $\chi$  в качестве независимых параметров спирали не вполне удобно, так как область варьирования  $\chi$  не всегда однозначна.

Рис. 2. Схема сопряжения повторяющихся элементарных звеньев линейного полимера в спираль

Удобнее задавать поворот мономерного звена вокруг  $a$  двугранным углом  $\delta$ , образованным двумя плоскостями, в которых лежат соответственно векторы  $a$ ,  $X_m$  и векторы  $a$ ,  $\rho$ . Связь между значением  $\delta$  и ранее определенным углом  $\chi$ , необходимым для построения  $\rho$ , имеет вид

$$\cos \delta = \frac{\cos \chi - \cos \eta \cdot \cos \alpha}{\sin \eta \cdot \sin \alpha},$$

где  $\alpha$  — угол между  $a$  и  $X_m$ . Далее везде будет подразумеваться, что  $\delta > 0$ , когда тройка векторов  $\rho$ ,  $a$  и  $X_m$  правая.

Таким образом, конформация спирали легко находится для любого значения  $a$  заданием двух независимых параметров  $h$  и  $\delta$ . Напомним, что тип спирали, определяемый углом закрутки  $\alpha$ , полагается известным и неизменным.

Главное преимущество данного алгоритма заключается в простоте отыскания оптимальных конформаций в ходе минимизации энергии. Это объясняется двумя обстоятельствами: во-первых, шаг спирали (величина известная из эксперимента) оказывается независимым параметром сочленения, что очень удобно при конкретных вычислениях; во-вторых, изменение конформации основной цепи при заданных  $h$  и  $\alpha$  достигается варьированием всего одной переменной – двугранного угла  $\delta$ . Кроме того, алгоритм применим к макромолекулам любой симметрии и с любым строением основной цепи.

Описанный выше алгоритм был предложен независимо в работах [19, 20]. Хотя авторы работы [20], по-видимому, использовали данный метод построения спирали и в более ранних исследованиях, детальное описание алгоритма появилось только в работе [20]. Следует отметить, что Цугенмайер и Сарко [20] при поиске структурной модели оптимизируют внутренние геометрические параметры относительно набора стандартных значений (одновременно уточняется положение полимерной цепи в элементарной ячейке). Такой подход, с нашей точки зрения, содержит следующие недостатки: 1) известную неопределенность в выборе используемой весовой схемы и некоторых стандартных значений; 2) невозможность точной оценки положения минимумов потенциальной поверхности и относительной стабильности различных конформаций.

Мы рассчитывали энергию спирали  $E_c$  как сумму двух компонентов:  $E_c = E_m + E_{\text{сочл}}$ , где  $E_m$  – внутренняя энергия исходного мономерного звена, а  $E_{\text{сочл}}$  – энергия сочленения. Величина  $E_m$  одинакова для всех элементарных звеньев и определяется только  $3N - 6$  независимыми координатами мономерного звена ( $N$  – число атомов в звене). В конкретном расчете варьировались лишь шесть из этих координат (рис. 1). В энергию сочленения входят энергии невалентных взаимодействий элементарных звеньев, включая возможные водородные связи, и энергия деформации валентных и торсионных углов в сочленении. В отличие от значения  $E_m$  величина  $E_c$  зависит уже и от параметров спирали  $\delta$  и  $h$ . Таким образом, полная энергия полимерной цепи представляет собой функцию восьми переменных:

$$E_c = E_c(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4, \omega_5, \omega_6, \delta, h).$$

Устойчивые конформации спиральной макромолекулы хитина находились минимизацией  $E_c$  в пространстве восьми варьируемых переменных. Минимизацию проводили методом Давидона – Флетчера – Паузэлла [21].

В соответствии с результатами, полученными в работе [20], при минимизации начальные значения  $\delta$  брали из интервала  $44^\circ < \delta < 58^\circ$ , а начальное значение  $h$  принимали равным 5,2 Å (экспериментальные значения периода идентичности вдоль оси спиральной макромолекулы в  $\alpha$ - и  $\beta$ -формификациях хитина равны 10,3–10,4 Å). Что касается шести варьируемых координат мономерного звена, то их исходные для минимизации значения выбирали с помощью шароигловой модели фрагмента полимерной цепи хитина.

В результате расчетов было обнаружено восемь устойчивых конформаций макромолекулы хитина. В табл. 1 и 2 они обозначены как A1, A2, A3, B1, B2, C1, C2 и D (проекции всех конформаций на плоскость  $X_hZ_h$  изображены на рис. 1 и 3; штриховыми линиями показаны водородные связи, реализующиеся в данной конформации). Отличие конформаций типа А от конформации типа В заключается в способе образования связи N2...O6'. В конформациях А реализуется связь O6'-H...N2, а конформации В характеризуются связью N2-H...O6'. В конформациях типа С образуются водородные связи O6'-H...O7.

В первых восьми столбцах табл. 1 приведены значения независимых переменных, соответствующих локальным минимумам энергии спирали  $E_c$ , в следующих трех столбцах – значения зависимых параметров сочленения; угол гликозидной связи  $\beta$ , углы  $\phi$  и  $\psi$ , которые обычно используют для описания взаимной ориентации циклов в полисахаридах (величины углов и знаки соответствуют номенклатуре, предложенной Сундарарайяном и Рао [22]). Далее приводятся энергетические характеристики устойчивых конформаций.

Геометрические параметры водородных связей (A–H...B), образующихся в каждой из конформаций (расстояние A...B и H...B, а также углы A–H...B и энергии водородных связей), приведены в табл. 2.

Из табл. 2 видно, что для семи стабильных конформаций макромолекулы хитина характерно наличие водородной связи O3'-H...O5. В шести случаях (A1, A3, B1, B2, C1, C2) ее энергии практически одинаковы и близки к –22 кДж/моль, а в конформации D величина энергии равна

Таблица 1

## Структурные и энергетические параметры устойчивых конформаций макромолекулы хитина

Конфор-мация	Независимые варьируемые параметры, град								Зависимые параметры, град			$E_M$	$E_{\text{сочл}}$	$E_c$
	$\omega_1$	$\omega_2$	$\omega_3$	$\omega_4$	$\omega_5$	$\omega_6$	$\delta$	$h_0^*$	$\beta$	$\phi$	$\psi$	кДж/моль		
A1	54,8	-29,0	-153,6	170,9	181,4	51,0	45,6	5,15	117,1	29,2	-30,6	-8,4	-23,1	-31,5
A2	55,2	-25,3	-160,6	-9,5	178,5	53,2	43,8	5,15	117,0	28,0	-29,4	-20,6	-1,7	-22,3
A3	-17,7	70,2	-109,8	178,8	183,3	182,2	40,9	5,15	116,1	26,6	-27,9	1,7	-7,1	-5,4
B1	54,6	178,8	193,4	173,1	186,7	137,8	44,1	5,15	116,9	28,3	-29,7	-8,4	11,3	2,9
B2	-30,7	182,3	204,3	186,8	173,9	181,2	34,2	5,14	113,8	23,2	-24,3	-4,6	9,2	4,6
C1	115,1	-60,0	-91,7	166,3	182,9	179,0	49,2	5,15	118,1	31,2	-32,7	2,1	-2,5	-0,4
C2	55,7	63,9	46,0	181,2	167,5	178,9	37,7	5,13	114,1	25,2	-26,5	8,0	2,5	10,5
D	192,2	37,3	-97,0	-126,9	179,8	176,6	58,0	5,09	117,8	37,7	-39,4	-7,1	11,3	4,2

\* В ангстремах.

Таблица 2

## Параметры водородных связей, присутствующих в устойчивых конформациях макромолекулы хитина

Конфор-мация	Тип связи	$R_{A \dots B}$	$R_{B \dots H}$	$\angle A - H \dots B$ , град	Энергия связи, кДж/моль	Конфор-мация	Тип связи	$R_{A \dots B}$	$R_{B \dots H}$	$\angle A - H \dots B$ , град	Энергия связи, кДж/моль
		Å	Å					Å	Å		
A1	O5...HO3'	2,56	1,76	136,9	-22,3	B1	O5...HO3'	2,59	1,77	139,5	-22,7
	O1...HO6'	2,60	1,85	131,8	-18,9		N2H...O6'	2,59	2,15	103,8	-8,0
	N2...HO6'	2,62	1,94	124,9	-27,3		O5...HO3'	2,68	1,80	148,5	-21,8
A2	O3H...O7'	2,59	1,78	138,2	-22,3	B2	N2H...O6'	2,99	2,13	111,0	-10,1
	O1...HO6'	2,60	1,85	131,4	-18,9		O5...HO3'	2,53	1,76	143,2	-21,8
	N2...HO6'	2,53	1,95	115,7	-26,0		O7...HO6'	2,60	1,77	132,8	-22,7
A3	O5...HO3'	2,62	1,77	143,7	-22,7	C2	O5...HO3'	2,62	1,77	143,7	-23,1
	N2...HO6'	2,88	1,95	157,8	-27,7		O7...HO6'	2,75	1,84	154,1	-20,2
						D	O5...HO3'	2,34	1,79	112,2	-15,1
							O6H...O3'	2,70	1,82	148,5	-21,0

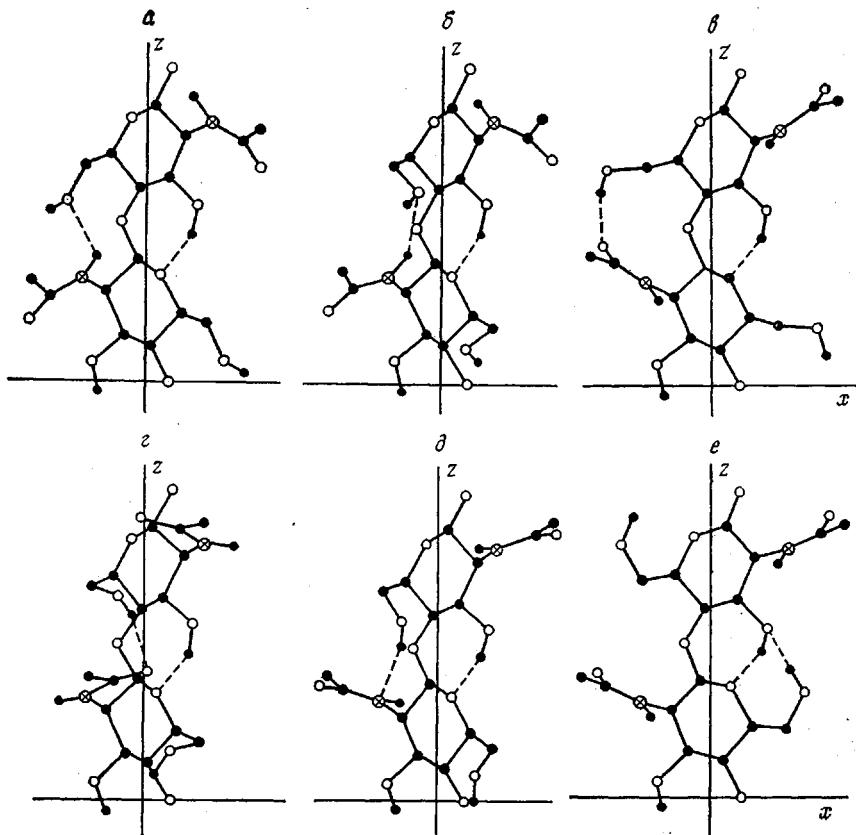


Рис. 3. Проекции устойчивых конформаций В1 (а), В2 (б), С1 (с), С2 (д), А3 (е) и Д (ж) макромолекулы хитина

–15,1 кДж/моль. Это уменьшение можно объяснить значительным отклонением связи ОЗ'–Н...О5 от линейной (табл. 2). Вообще надо отметить, что значения углов А–Н...В почти во всех случаях вполне удовлетворительны (как известно, внутримолекулярные Н-связи далеко не всегда линейны и для них характерны самые разные величины углов при атоме водорода [23]). Все без исключения авторы [3–8] считают образование водородной связи ОЗ'–Н...О5 непреложным законом. Однако наш расчет показал, что возможна конформация (А2, рис. 1), в которой гидроксильная группа при атоме С3 участвует в формировании водородной связи внутри мономерного звена (акцептором протона служит карбоксильный кислород). Учет такой Н-связи может помочь при интерпретации весьма сложной части ИК-спектра хитина, относящейся к аминоацетильной группе.

По данным ИК-спектроскопии, все гидроксильные группы макромолекулы хитина должны принимать участие в образовании водородных связей [24]. В шести найденных конформациях это требование выполнено (табл. 2, рис. 1 и 3) за счет внутримолекулярных Н-связей. Если же в кристалле реализуются конформации типа В (рис. 3, а, б), то вполне возможно формирование межмолекулярной водородной связи с участием свободного водорода оксиметиленовой группы. Что касается относительного расположения этой группы ( $-\text{CH}_2\text{OH}$ ), то, как видно из табл. 1, ее ориентация в конформациях А1, А2 и В1 близка к *tg*-положению ( $\omega_1=60^\circ$ ), в конформации Д – к *gt*-положению ( $\omega_1=180^\circ$ ) и в конформации В2 – к *gg*-положению ( $\omega_1=-60^\circ$ ). В конформации С1 реализуется заслоненное положение.

Кроме оксиметиленовой в хитине существует еще одна боковая группа значительных размеров – аминоацетильная. Обычно считают, что она имеет плоское строение (т. е.  $\omega_5=180^\circ$ ). Наши расчеты подтверждают это

мнение, однако надо иметь в виду, что неплоские деформации в пределах 10° вполне реальны (табл. 1).

Анализируя геометрические параметры рассчитанных конформаций макромолекулы хитина (табл. 1), можно сделать следующие выводы: 1) в семи конформациях равновесное значение шага спирали хорошо согласуется с экспериментальным периодом повторяемости вдоль оси волокна (10,3–10,4 Å); некоторое уменьшение значения  $h$  в конформации D объясняется, по-видимому, образованием водородной связи O6—H...O3'; 2) величины угла при гликозидном атоме кислорода близки к значениям этого угла, обычно наблюдаемым в полисахарах; 3) торсионные углы  $\phi$  и  $\psi$  отличаются от соответствующих углов в предлагаемых структурных моделях хитина [5–8] не более чем на 5–6°.

Весьма интересен вопрос об относительной стабильности различных конформеров. Энергетические характеристики спиральных макромолекул хитина, приведенные в табл. 1, показывают, что наиболее предпочтительны конформации A1 и A2. В обеих конформациях присутствует бифур-

O1

катная водородная связь O6'—H...N2. В рамках метода атом-атомных N2

потенциалов энергия такой связи аддитивно складывается из энергий связи O6'—H...N2 и O6'—H...O1. Получающаяся величина, вероятно, завышена по двум причинам: во-первых, неаддитивность взаимодействий может в данном случае играть важную роль; во-вторых, сама по себе оценка энергии связи O6'—H...N2, по-видимому, также завышена. Однако необходимо отметить, что, если даже использовать при расчете энергии связи O6'—H...N2 параметры кривой взаимодействия H...N2, отличающиеся от тех, которые были приняты нами (например, задать существенно меньшую величину энергии диссоциации), все равно энергии конформаций A1 и A2 окажутся ниже энергий остальных конформаций.

В результате расчетов конформационной энергии изолированной макромолекулы хитина, проведенных при фиксированной геометрии глюкопиранозного цикла, определены восемь наиболее устойчивых конформаций, отличающихся по энергии. Для оптимальных конформаций макромолекулы хитина характерно образование различных систем водородных связей. Существование восьми наиболее устойчивых конформационных состояний показывает, что макромолекулярная спираль хитина представляет собой значительно более лабильную систему, чем предполагалось ранее. Учет этого обстоятельства, с нашей точки зрения, поможет детальнее разобраться в строении различных модификаций хитина.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Mazzarelli R. A. A. Chitin. Oxford: Pergamon Press, 1977, p. 5.
2. Rudall K. M. Advances Insect Physiol., 1963, v. 1, p. 257.
3. Carlstrom D. J. Biophys. Biochem. Cytol., 1957, v. 3, № 5, p. 669.
4. Ramakrishnan C., Prasad N. Biochim. et biophys. acta, 1972, v. 261, № 1, p. 123.
5. Minke R., Blackwell J. J. Molec. biol., 1978, v. 120, № 2, p. 167.
6. Dweltz N. E. Biochim. et biophys. acta, 1961, v. 51, № 2, p. 283.
7. Blackwell J. Biopolymers, 1969, v. 7, № 3, p. 281.
8. Gardner K. H., Blackwell J. Biopolymers, 1975, v. 14, № 8, p. 1581.
9. Natta G., Corradini P. J. Polymer Sci., 1959, v. 39, № 135, p. 29.
10. Дащевский В. Г. Конформации органических молекул. М.: Химия, 1974, с. 111.
11. Попов Е. М., Дащевский В. Г., Липкинд Г. М., Архипова С. Ф. Молек. биол., 1968, т. 2, № 4, с. 612.
12. Саркисов Г. Н., Дахис М. И., Маленков Г. Г., Дащевский В. Г. Докл. АН СССР, 1972, т. 205, № 3, с. 638.
13. Umezawa H., Morokuma K. J. Amer. Chem. Soc., 1977, v. 99, № 5, p. 1316.
14. Arnott S., Scott W. E. J. Chem. Soc. Perkin Trans. II, 1972, № 3, p. 324.
15. Бландел Т., Джонсон Л. Кристаллография белка. М.: Мир, 1979, с. 35.
16. Kolpak F. J., Blackwell J. Macromolecules, v. 9, № 2, p. 273.
17. McGuire R. F., Vanderkool G., Momany F. A., Ingwall R. T., Crippen G. M., Lottan N., Tuttle R. W., Kashuba K. L., Scheraga H. A. Macromolecules, 1971, v. 4, № 1, p. 112.
18. Sugeta H., Miyazawa T. Biopolymers, 1967, v. 5, № 7, p. 673.

19. Перцин А. И., Нугманов О. К., Солин В. Ф., Марченко Г. Н., Киргизгородский А. И.  
Высокомолек. соед. А, 1981, т. 23, № 10, с. 2147.
20. Zugenmaier P., Sarko A. Amer. Chem. Soc. Symposium Series, 1980, № 141, p. 225.
21. Fletcher R., Powell M. J. D. Computer J. 1963, v. 6, № 1, p. 163.
22. Sundarajan P. R., Rao V. S. R. Biopolymers, 1969, v. 8, № 3, p. 305.
23. Raumgarten H. E., McMahan D. G., Elia V. J., Gold B. I., Day V. W., Day R. O.  
J. Organ. Chem., 1976, v. 41, № 24, p. 3798.
24. Pearson F. G., Marchessault R. H., Liang C. Y. J. Polymer Sci., 1960, v. 43, № 141,  
p. 101.

Московский государственный  
университет им. М. В. Ломоносова  
Институт элементоорганических  
соединений им. А. Н. Несмейнова  
АН СССР

Поступила в редакцию  
19.XI.1981

## CONFORMATION OF AN ISOLATED MACROMOLECULE OF CHITINE

*Yelagin A. L., Pertsin A. I.*

### Summary

The optimal conformations of an isolated helix macromolecule of chitine have been found by the minimization of total energy as a function of independent conformational parameters. The energy is calculated by the method of atom-atom potentials. The problem of building of the regular helix is solved with the aid of special algorithm of conjugation of repeating units of the linear polymer into the helix of given symmetry. The most stable conformation is characterized by the presence of hydrogen bond O3'-H...O5, O6'-H...N2 and O6'-H...O1. The calculated value of the repeating period along the axis of the helix macromolecule coincides with the experimental value.