

ЛИТЕРАТУРА

1. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов.- М.: Наука, 1982.
2. Ма Ш. Современная теория критических явлений. - М.: Мир, 1980.
3. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем.-М.: Наука, 1979.
4. Наркевич И.И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред. Дисс. докт. физ.-мат. наук. -С.-П.: СПбГУ, 1993.
5. Фишер М. Природа критического состояния. -М.: Мир, 1968.
6. Наркевич И.И., Лобко С.И., Жаркевич А.В., Хроль В.Н. Уравнение состояния типа Ван-дер-Ваальса для кристаллической, жидкой и газообразной фаз // Труды БГТУ. - 1997, № 4. -С. 46-55.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Т. 5. Часть 1. -М.: Наука, 1976.
8. Наркевич И.И., Клинецвич С.И., Жаркевич А.В. Учет вкладов от флуктуаций поля плотности в термодинамические свойства среды в критической области // Труды БГТУ. - 1996, № 3. -С. 64-70.

УДК 536.758

В.Б. Немцов, профессор

ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СТЕРЖНЯ КАК МОДЕЛЬ МОЛЕКУЛЫ ДНК

Some aspects of deformation and thermodynamics of the DNA molecule are considered in the terms of its liquid crystal model proposed previously. The new caloric effect due to bending of the DNA molecule is predicted.

Одной из широко используемых теоретических моделей ДНК является ее модель в виде тонкого упругого стержня. При этом внутренняя структура молекулы не учитывается [1-3].

Между тем в ряде работ было выдвинуто представление о том, что молекула ДНК может рассматриваться как внутримолекулярный жидкий кристалл (см. обзорную работу А.С. Сонины [4]). Однако в упомянутых работах конкретная модель подобного типа не была разработана. В недавних наших работах [5-7] была предложена конкретная модель молекулы ДНК в форме одномерного хирального смектического жидкого кристалла. Согласно этой модели смектические слои, образованные азотистыми основаниями, в среднем перпендикулярны оси двойной спирали. Азотистые основания поворачиваются вокруг этой оси по мере продвижения вдоль

нее подобно среднему развороту молекул хиральных смектиков относительно их осей.

Цель данной работы состоит в том, чтобы установить взаимосвязь между описанием деформации в классической теории упругих стержней Кирхгофа-Клебша и ее описанием в терминах ориентационной деформации жидких кристаллов. На основании упомянутой взаимосвязи представляется возможным использовать методы теории жидких кристаллов для анализа деформации молекулы ДНК и ее упругости с помощью ее жидкокристаллической модели.

Согласно используемой в классической теории стержней гипотезе плоских сечений, деформация стержня описывается неодинаковым вдоль оси стержня движением плоского поперечного сечения стержня как твердого тела.

Не рассматривая здесь поступательное движение сечения по оси стержня, приводящее к его растяжению, ограничимся исследованием поворотов плоских сечений, проявляющихся в изгибе и кручении стержня при действии на него внешних сил.

Для описания деформации стержня свяжем с его поперечным сечением ортогональную тройку векторов e_1 , e_2 и e_3 . Указанные векторы образуют локальную систему координат. Вектор e_3 перпендикулярен сечению и направляется по касательной к оси стержня. Векторы e_1 и e_2 лежат в плоскости сечения и совпадают с его главными осями.

Обозначим через $d\psi$ вектор малого взаимного поворота двух соседних локальных систем координат, находящихся на расстоянии ds друг от друга (s - дуговая координата, отсчитываемая вдоль оси стержня). "Скорость" разворота локальной системы осей при ее смещении по оси стержня определяется аксиальным вектором

$$\Omega = d\psi/ds. \quad (1)$$

Разложим вектор Ω на составляющие по ортогональному базису e_1 , e_2 , e_3

$$\Omega = \Omega_1 e_1 + \Omega_2 e_2 + \Omega_3 e_3. \quad (2)$$

Составляющая Ω_3 описывает кручение стержня, а составляющие Ω_1 и Ω_2 - его изгиб.

В естественной системе координат, определяемой единичными векторами касательной, нормали и бинормали, вектор Ω имеет две составляющие, одна из которых является кручением стержня (и его оси), а вторая характеризует кривизну оси стержня [8].

В системе осей, определяемой базисом e_1 , e_2 , e_3 , Ω_1 и Ω_2 представляют компоненты вектора кривизны, а вектор Ω является вектором кривиз-

ны-кручения. Производные ортов $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ по дуговой координате записываются как [2, 9]

$$d\mathbf{e}_i/ds = \Omega \times \mathbf{e}_i \quad (3)$$

или

$$\begin{aligned} d\mathbf{e}_1/ds &= -\Omega_2 \mathbf{e}_3 + \Omega_3 \mathbf{e}_2, \\ d\mathbf{e}_2/ds &= \Omega_1 \mathbf{e}_3 - \Omega_3 \mathbf{e}_1, \\ d\mathbf{e}_3/ds &= -\Omega_1 \mathbf{e}_2 + \Omega_2 \mathbf{e}_1. \end{aligned} \quad (4)$$

Рассмотрим кинематику ориентационной деформации жидких кристаллов. Пусть α_{lk} - ортогональная матрица, описывающая средний поворот от молекулярной к глобальной лабораторной системе координат. Ориентационная деформация описывается псевдотензором [7, 10]

$$\gamma_{mn} = \frac{1}{2} e_{mkt} \alpha_{lk} (\partial \alpha_{tk} / \partial x_n), \quad (5)$$

где e_{mkt} - тензор Леви-Чивита.

Тензор γ_{mn} представляет собой совокупность "отношений" составляющих малого угла взаимного разворота $\delta\theta_m = \frac{1}{2} e_{mkt} \alpha_{lk} \delta\alpha_{tk}$ двух соседних частиц среды, радиусы-векторы которых отличаются на $\delta\mathbf{x}$, к составляющим вектора $\delta\mathbf{x}$.

Трансформируем это трехмерное описание ориентационной деформации к одномерному случаю жидкокристаллической модели молекулы ДНК. Для этого матрицу поворота α_{lk} будем рассматривать как матрицу поворота комплементарной пары оснований, представляемых в виде недеформируемой плоской фигуры, которая служит поперечным сечением для модели ДНК в виде упругого стержня.

В одномерном случае тензор γ_{mn} становится псевдовектором ($\delta\mathbf{x} \rightarrow \delta s$)

$$\gamma_m = \frac{1}{2} e_{mkt} \alpha_{lk} (d\alpha_{tk} / ds). \quad (6)$$

С упомянутой парой азотистых оснований свяжем ортогональную тройку векторов $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ и \mathbf{e}_3 таким образом, что вектор \mathbf{e}_3 направляется перпендикулярно комплементарной паре вдоль оси двойной спирали, а векторы \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 лежат в плоскости этой пары. Пусть вектор \mathbf{e}_1 параллелен короткой оси пары оснований, а вектор \mathbf{e}_2 идет вдоль ее длинной оси. Векторы \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 можно рассматривать как директоры двухосного смектического жидкого кристалла.

Элементы матрицы поворота можно выразить через компоненты ортогональной тройки векторов с помощью следующих соотношений:

$$e_{3i} = \alpha_{i3}, \quad e_{1i} = \alpha_{i1}, \quad e_{2i} = \alpha_{i2}. \quad (7)$$

Тогда вектор ориентационной деформации можно записать в форме

$$\gamma_m = \frac{1}{2} e_{mnl} \left(e_{1n} \frac{de_{1l}}{ds} + e_{2n} \frac{de_{2l}}{ds} + e_{3n} \frac{de_{3l}}{ds} \right)$$

или

$$\gamma = \frac{1}{2} \left(\mathbf{e}_1 \times \frac{d\mathbf{e}_1}{ds} + \mathbf{e}_2 \times \frac{d\mathbf{e}_2}{ds} + \mathbf{e}_3 \times \frac{d\mathbf{e}_3}{ds} \right). \quad (8)$$

Используя кинематические соотношения (4), установим простую связь между обоими рассматриваемыми способами описания деформации стержня

$$\gamma = \Omega_1 \mathbf{e}_1 + \Omega_2 \mathbf{e}_2 + \Omega_3 \mathbf{e}_3 = \Omega. \quad (9)$$

Таким образом, компоненты вектора ориентационной деформации являются компонентами вектора кривизны-кручения упругого стержня.

Если упругий стержень в исходном недеформированном состоянии закручен и изогнут, как это имеет место в случае молекулы ДНК, то существуют компоненты вектора γ в этом недеформированном состоянии, обозначаемые как

$$\gamma^0 = \Omega_1^0 \mathbf{e}_1 + \Omega_2^0 \mathbf{e}_2 + \Omega_3^0 \mathbf{e}_3. \quad (10)$$

Основываясь на соотношении (9), можно, следуя [5-7], преобразовать материальное уравнение [7-10] для тензора моментных напряжений

$$\pi_{ij} = K_{ijkl} (\gamma_{kl} - \gamma_{kl}^0) \quad (11)$$

в материальное уравнение для упругого стержня

$$M_i = K_{ik} (\gamma_k - \gamma_k^0). \quad (12)$$

В результате этой трансформации моментные напряжения становятся изгибающими моментами M_1 и M_2 и крутящим моментом M_3 , действующими в поперечных сечениях стержня.

Тензор модулей ориентационной упругости Франка K_{ijkl} переходит в тензор K_{ik} коэффициентов жесткости стержня на изгиб и кручение.

Не конкретизируя структуру тензора K_{ik} , отметим возможность использовать разработанную статистическую теорию модулей упругости Франка K_{ijkl} [7] для расчета изгибной и крутильной жесткости молекулы ДНК по параметрам взаимодействия азотистых оснований.

Рассмотрим свободную энергию f и термодинамический потенциал Гиббса φ , отнесенные к единице длины стержня. Свободная энергия записывается в виде

$$f = \frac{1}{2} M_i \gamma_i + f_0(T) = \frac{1}{2} K_{ij} (\gamma_i - \gamma_i^0)(\gamma_j - \gamma_j^0) + f_0(T), \quad (13)$$

где $f_0(T)$ - некоторая функция температуры, а термодинамический потенциал $\varphi = f - M_i \gamma_i$. Для них справедливы соотношения

$$df = M_i d\gamma_i - S dT, \quad d\varphi = -\gamma_i dM_i - S dT, \quad (14)$$

где T - абсолютная температура, а S - энтропия единицы длины.

По аналогии с коэффициентами теплового расширения α_{ij} и термическими коэффициентами ориентационной деформации β_{ij} [11], введем термические коэффициенты деформации изгиба

$$\beta_1 = (\partial \Omega_1^0 / \partial T)_{P,M}, \quad \beta_2 = (\partial \Omega_2^0 / \partial T)_{P,M}, \quad (15)$$

где P - давление. Вместе с ранее использованным [6, 7] термическим коэффициентом кручения $\beta_3 = (\partial \Omega_3^0 / \partial T)_{P,M}$ получим вектор термических коэффициентов деформации изгиба и кручения

$$\beta = (\partial \Omega^0 / \partial T)_{P,M}. \quad (16)$$

Отметим, что коэффициенты β_i относятся к исходному недеформированному состоянию. Будучи псевдовекторами, они не равны нулю для хирального стержня, каким является молекула ДНК.

Как показано в [6, 7], коэффициент β_3 может быть записан в форме $\beta_3 = -(2\pi / p_0^2)(\partial p_0 / \partial T)_{P,M}$, где p_0 - шаг двойной спирали молекулы ДНК.

Используя соотношение (14) для $d\varphi$, получим выражения

$$\gamma_i = -(\partial \varphi / \partial M_i)_{T,P}, \quad S = -(\partial \varphi / \partial T)_{P,M}, \quad (17)$$

и поэтому термические коэффициенты деформации изгиба и кручения ($\gamma_i = \Omega_i$) выражаются через линейную плотность энтропии

$$\beta_1 = (\partial S / \partial M_1)_{T,P}, \quad \beta_2 = (\partial S / \partial M_2)_{T,P}, \quad \beta_3 = (\partial S / \partial M_3)_{T,P}. \quad (18)$$

Рассматривая энтропию как функцию M_i и T , получим следующее уравнение для дифференциала энтропии:

$$dS = \beta_1 dM_1 + \beta_2 dM_2 + \beta_3 dM_3 + c_P T_0^{-1} dT, \quad (19)$$

где c_p - теплоемкость, а T_0 - температура в недеформированном состоянии.

Первые два члена в полученном соотношении описывают новый калорический эффект, обусловленный изгибом хирального стержня типа молекулы ДНК, который изогнут в начальном недеформированном состоянии.

Таким образом, не только деформация кручения хирального стержня с начальной закруткой, как было показано раньше [5-7, 11], но и деформация изгиба сопровождается тепловым эффектом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Франк-Каменецкий М.Д. Теоретические модели ДНК // Итоги науки и техники. Молекулярная биология. - М.: ВИНТИ: - 1979. - Т. 15. - С. 42 - 73.
2. Marko J.F., Siggia E.D. Bending and Twisting Elasticity of DNA // *Macromolecules*. - 1994. - V. 27. - P. 981 - 988.
3. Yang Y., Couchman L.S. Elastic theory of nucleosomal DNA // *Proc. Soc. Lond.* - 1997. - V. 453. - P. 225 - 254.
4. Сонин А.С. Жидкие кристаллы. Что же все-таки это такое? (К 100-летию открытия) // *Журн. структ. химии*. - 1991. - Т. 32. - С. 137 - 155.
5. Nemtsov V.B. A liquid crystal model of DNA molecule and its application to the melting problem // *Abstr. 16 Intern. Liq. Cryst. Conf., Kent, USA, June 24 - 28, 1996*, P. 65.
6. Nemtsov V.B. A DNA molecule as a chiral smectic liquid crystal // *Abstr. European Conf. Liq. Cryst. Conf., Zakopane, Poland, March 3 - 8, 1997*- P. 370.
7. Немцов В.Б. Неравновесная статистическая механика систем с ориентационным порядком. - Мн: Тэхналогія, 1997.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. - М.: Наука, 1987.
9. Светлицкий В.А. Механика гибких стержней и нитей. - М.: Машиностроение, 1978.
10. Nemtsov V.B. Statistical hydrodynamics of cholesteric liquid crystals // *Physica*. - 1977. - V. 86A, № 3. - P. 513 - 534.
11. Nemtsov V.B., Vikhrenko V.S. Deformation energetic effects for cholesteric liquid crystals // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* - 1995. - V. 262. - P. 569 - 575.