

А.Н. Камлюк, ассистент; В.Б. Немцов, профессор; А.В. Ширко, студент

## КОНТАКТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВЕТВЕЙ СВЕРХСПИРАЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ ДНК

Magnitudes the contact interaction in supercoiled DNA molecule are calculated.

Для достаточно длинных молекулярных цепей при определенных условиях наблюдаются закручивание ДНК вокруг самой себя (как происходит со скрученным телефонным шнуром). В работе [1] показано, что наиболее вероятно, биологическая реализация такого процесса происходит во время транскрипции линейной ДНК. Крутящий момент, порождаемый действием РНК-полимеразы, приложен к двойной спирали при ее транскрипции. Численное значение такого момента примерно  $M=4.14 \cdot 10^{-20}$  Н·м.

Однако в приведенной работе детально изучалось только начало процесса сверхспирализации молекулы ДНК, а возможность плектонемической сверхспирализации осталась неизученной.

Цель данной работы состоит в численном расчете параметров силового взаимодействия ветвей сверхспиральных молекул ДНК.

Ранние работы показали, что простая модель молекулы ДНК в виде цилиндрического, упругого стержня дает объяснения многим свойствам ее крупномасштабного поведения, например сверхспирализации [3]. Поэтому исследование сверхспиральных структур и проведем с помощью такой модели.

Всем хорошо известно, как скручивается телефонный шнур. Такое образование можно называть свивкой и считать упругим. Свивку можно распутать, и остаточных деформаций в шнуре не обнаруживается. Видимая однородность витков дает основание предположить однородность силового взаимодействия по длине свивки  $l$ . На участках  $l_1$  и  $l_2$ , надо полагать, возникают отступления от этой однородности, зависящие от характера сил, которые приложены за пределами длины  $L$  (рис. 1).

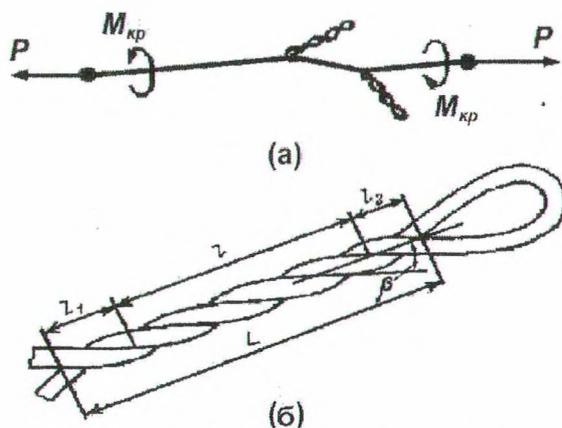


Рис. 1. Образование сверхспиральных структур: (а) – общая схема, (б) – сверхспирализованная ветвь

Определим условия силового взаимодействия и контактного взаимодействия ветвей на участке  $l$  и установим, от каких параметров и как зависит угол свивки  $\beta$ .

Рассмотрим эту задачу аналогично, как это сделано в предположении [4], что к выходной (замыкающей) петле (рис. 1) справа никаких сил не приложено. Естественно принять, что на длине  $l$  угол свивки  $\beta$  остается постоянным, а между жилами на этом же участке возникает равномерно распределенная нагрузка интенсивностью  $q$ . Линия контакта представляет собой прямую, а осевая линия каждой жилы – винтовую линию, радиус которой равен радиусу поперечного сечения жилы.

Таким образом, свивка представляет собой две одинаковые, вписанные одна в другую винтовые линии. Естественно, они могут совмещаться одна с другой только в определенных геометрических пределах.

В произвольно взятой точке касания  $A$  (рис. 3) поверхность каждого винтообразно изогнутого стержня имеет отрицательную гауссову кривизну. Первая главная линия кривизны  $S_1$  представляет собой окружность радиусом  $r$ . Радиус второй главной дуги кривизны  $S_2$  определяется разностью

$$\rho(S_2) = \frac{r}{\sin^2 \beta} - r, \quad (1)$$

где первое слагаемое в правой части есть радиус кривизны центральной винтовой линии стержня. Таким образом,  $\rho(S_2) = r/\text{tg}^2 \beta$ .

Нормаль  $\nu$  в точке  $A$  является одновременно и нормалью к поверхности второго винтового стержня, а последовательность точек касания  $A$  образует ось свивки – вертикальную прямую, показанную на рис. 2.

Второй стержень уместится в проеме первого только в случае, если  $\rho(S_1) > \rho(S_2)$ , т. е. если  $\beta < 45^\circ$ . Это и есть условие существования контакта между стержнями по общей прямой – оси свивки.

Будем считать, что  $\beta < 45^\circ$ , и рассмотрим свивку общим для двух жил поперечным сечением. Введем в этом общем сечении систему самоуравновешенных внутренних сил, которые сводятся к моментам  $M_1$  и  $M_2$  и силе  $Q_1$  (рис. 3).

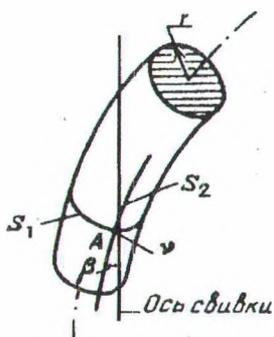


Рис. 2. К определению условия существования контакта между ветвями свивки

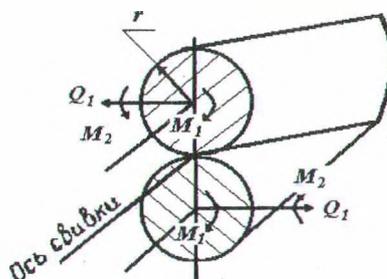


Рис. 3. Схема поперечного сечения свивки

Моменты  $M_1$  и  $M_2$  не являются ни крутящими, ни изгибающими. Они возникают в сечениях, не перпендикулярных оси жил. Из условия равновесия следует

$$Q_1 r = M_1. \quad (2)$$

Построим воображаемую цилиндрическую поверхность радиусом  $r$  с осью, совпадающей с осью свивки (рис. 4). Упругая линия каждой из двух жил расположится на поверхности этого цилиндра в виде винтовой линии. В начальной точке отсчета  $x$  приложены моменты  $M_1$  и  $M_2$ , векторы которых показаны на рис. 4 вместе с силой  $Q_1$ . Кроме того, по радиусу построенного цилиндра возникает контактная нагрузка интенсивностью  $q$ .

Теперь надо подобрать значения  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $Q_1$  и  $q$  так, чтобы в произвольно взятой точке  $B$  (рис. 4), независимо от  $x$  и  $\varphi$ , моменты  $M_1$  и  $M_2$  и сила  $Q_1$  были такими же, что и в точке  $O$ .

В точке  $B$  поместим подвижную систему осей  $x_1$ ,  $y_1$ ,  $z_1$ .

Составляющая сил по оси  $x_1$  обращается в нуль, поскольку  $Q_1$  и  $q$  перпендикулярна к оси  $x_1$ . Составляющие же по осям  $y_1$  и  $z_1$  будут

$$Y_{1B} = -Q_1 \cos \varphi - \int_0^x q \sin(\varphi - \psi) d\zeta,$$

$$Z_{1B} = -Q_1 \sin \varphi + \int_0^x q \sin(\varphi - \psi) d\zeta.$$

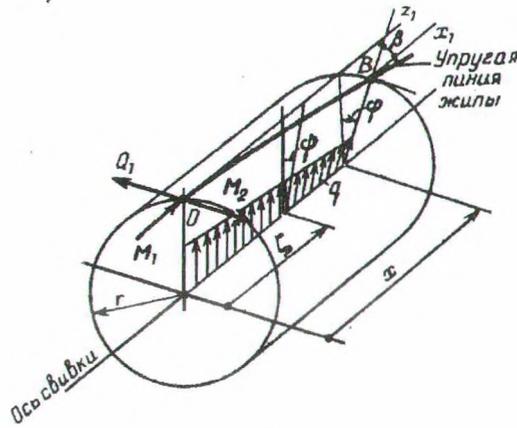


Рис. 4. Силовая схема

$\psi$  и  $\zeta$  связаны очевидным соотношением:

$$\zeta = r\psi \operatorname{ctg} \beta, \quad d\zeta = r \operatorname{ctg} \beta d\psi.$$

Исключаем  $d\zeta$  и после интегрирования по  $d\psi$  получим

$$Y_{1B} = -Q_1 \cos \varphi - q r \operatorname{ctg} \beta (1 - \cos \varphi),$$

$$Z_{1B} = -Q_1 \sin \varphi + q r \operatorname{ctg} \beta \sin \varphi.$$

Составляющая по оси  $y_1$  должна быть равна  $-Q_1$ , а составляющая по оси  $z_1$  обращается в нуль. Оба эти условия выполняются, если

$$Q_1 = q r \operatorname{ctg} \beta. \quad (3)$$

Теперь найдем составляющие момента по осям  $x_1$ ,  $y_1$  и  $z_1$ :

$$M_{Bx_1} = M_1 - Q_1 r (1 - \cos \varphi) + \int_0^x q \sin(\varphi - \psi) d\zeta,$$

$$M_{By_1} = M_2 \cos \varphi + Q_1 x \sin \varphi - \int_0^x q (x - \zeta) \cos(\varphi - \psi) d\zeta,$$

$$M_{Bz_1} = M_2 \sin \varphi - Q_1 x \cos \varphi - \int_0^x q (x - \zeta) \sin(\varphi - \psi) d\zeta.$$

Выражая  $\zeta$  через  $\psi$  и проведя интегрирование, получим

$$M_{Bx_1} = M_1 - Q_1 r (1 - \cos \varphi) + q r^2 \operatorname{ctg} \beta (1 - \cos \varphi),$$

$$M_{By_1} = M_2 \cos \varphi + Q_1 x \sin \varphi - q r \operatorname{ctg} \beta [x \sin \varphi - r (1 - \cos \varphi) \operatorname{ctg} \beta],$$

$$M_{Bz_1} = M_2 \sin \varphi - Q_1 x \cos \varphi - q r \operatorname{ctg} \beta [-x \sin \varphi + r \sin \varphi \operatorname{ctg} \beta].$$

Но  $M_{Bx_1}$  должно быть равно  $M_1$ ;  $M_{By_1} = M_2$ , а  $M_{Bz_1}$  должно обращаться в нуль, и все это независимо от  $x$  и  $\varphi$ . Легко установить, что эти требования выполняются, если в дополнение к условию (3) выполняется еще одно:

$$M_2 = qr^2 \operatorname{ctg}^2 \beta. \quad (4)$$

От сечения, нормального к оси свивки, перейдем к сечениям, нормальным к оси жил, и определим изгибающий  $M_n$  и крутящий  $M_k$  моменты (рис. 5), а также нормальную  $N$  и поперечную  $Q$  силы.

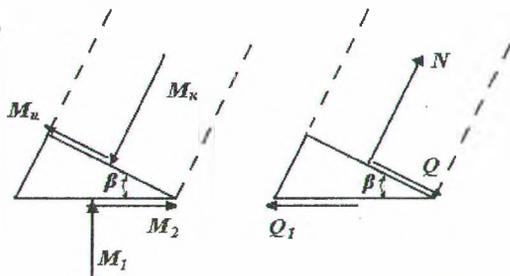


Рис. 5. Схема поперечного сечения оси жил

Из условий равновесия очевидно, что

$$\begin{aligned} M_k &= M_2 \cos \beta - M_1 \sin \beta, \\ M_n &= M_1 \cos \beta + M_2 \sin \beta, \\ Q &= Q_1 \cos \beta, \quad N = Q_1 \sin \beta. \end{aligned}$$

Воспользовавшись соотношениями (2) – (4), получим

$$M_n = q_0 r^2 (\operatorname{ctg}^2 \beta - 1), \quad M_k = 2q_0 r^2 \operatorname{ctg} \beta, \quad Q = q_0 r \operatorname{ctg} \beta, \quad N = q_0 r, \quad (5)$$

где  $q_0 = q \cos \beta$  – контактная нагрузка, приведенная к осевой линии жилы.

С другой стороны, изгибающий момент связан с изменением кривизны, а крутящий – с круткой стержня:

$$M_n = x_b \frac{\sin^2 \beta}{r}, \quad M_k = x_t \left[ \frac{\sin \beta \cos \beta}{r} + \frac{1}{r \cos \alpha} - \frac{2\pi}{H} \right]. \quad (6)$$

Здесь  $x_t$ ,  $x_b$  – жесткости на кручение и изгиб, отнесенные к одному моллю и к паре оснований (определены в работе [6]),  $\sin^2 \beta / r$  – кривизна винтовой линии, а  $\sin \beta \cos \beta / r$  – ее крутка;  $1 / r \cos \alpha$  – угол кручения, т.е. угол поворота, отнесенный к единице длины стержня ( $\alpha$  – угол подъема винтовой линии);  $1 / (2\pi H)$  – кручение в недеформированном состоянии ( $H$  – шаг спирали).

Получим количественную оценку силовых и контактных взаимодействий в ветвях сверхспирализованной молекулы ДНК для частного случая, когда выполняется следующее условие:

$$\frac{1}{r \cos \alpha} - \frac{2\pi}{H} = 0. \quad (7)$$

Условие (7) выполняется, если  $\alpha \approx 28^\circ$ .

Теперь подставим в выражения (6)  $M_n$  и  $M_k$  из (5) и, исключая  $q_0$ , получим

$$\operatorname{tg} \beta = \frac{1}{\sqrt{2e + 1}}, \quad (8)$$

где  $e = x_b / x_t$ .

Подставляя  $\beta$  из (7) в выражения (5) и (6), находим

$$M_k = \frac{x_b}{2r} \frac{1}{e+1}, \quad M_n = \frac{x_t}{2r} \frac{\sqrt{2e+1}}{e+1},$$

$$q_0 = \frac{x_t}{4r^3} \frac{1}{e+1}, \quad N = \frac{x_t}{4r^2} \frac{1}{e+1}, \quad Q = \frac{x_t}{4r^2} \frac{\sqrt{2e+1}}{e+1}. \quad (9)$$

Подставим численные значения величин  $x_t$  и  $x_b$  в формулы (9). В итоге найдем, что  $\beta \approx 20^\circ$ ;  $M_n = 4.9 \cdot 10^{-20}$  Н·м;  $M_k = 4.2 \cdot 10^{-20}$  Н·м;  $q_0 = 7.83 \cdot 10^{-3}$  Н/м;  $N = 7.83 \cdot 10^{-12}$  Н и  $Q = 21.2 \cdot 10^{-12}$  Н. Заметим, что полученный крутящий момент сравним с тем, что рассчитывался для транскрипции в работе [1].

Таким образом, впервые проведен численный расчет силовых характеристик взаимодействия ветвей сверхспиральных структур ДНК.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Marko J. F. // *Europhys. Lett.* – 1997. – V. 38, N. 3. – P. 183–188.
2. Haijun Zhou, Yang Zhang and Zhong-can Ou-Yang // *Phys. Rev. E.* – 2000. – V. 62, N. 1. – P. 1045–1058.
3. Kamien R.D., Lubensky T. C., Nelson P., O’Hern C.S. // *Europhys. Lett.* – 1997. – V. 38, N. 3. – P. 237–242.
4. Феодосьев В. И. Избранные задачи и вопросы по сопротивлению материалов. М.: Наука, 1996.
5. Nemtsov V.B., Kamlyuk A.N. // *Nonlinear Phenomena in Complex Systems.* – 2001. – V. 4, N. 1. – P. 58–63.
6. Nemtsov V.B., Kamlyuk A.N. // *Journal of Engineering Physics and Thermophysics.* – 2001. – V. 74, N. 5. – P. 1253–1261.