

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

РАСПРОСТРАНЕНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ ВДОЛЬ СВЕРХРАСТЯНУТЫХ МОЛЕКУЛ ДНК

Propagation of nonlinear waves in overstretching DNA molecules is considered.

Для поиска решений солитонного типа воспользуемся моделью молекулы ДНК в виде упругого стержня с внутренней структурой. При этом в рассмотрение будут включены только продольные смещения структурных элементов.

В работах [1, 2] была исследована нелинейная динамика ДНК в пределах ее контурной длины с учетом экспериментальных результатов, описанных в работе [3], отражающих влияние ионного окружения изучаемой молекулы.

Известно, что при выполнении своих биологических функций молекула ДНК находится в сверхрастянутом состоянии, когда ее длина превосходит значение контурной длины в два раза [4, 5]. При этом кривая растяжения имеет характерное плато при определенном значении растягивающей силы $F_p \approx 65$ пикоНьютонов (пН), т. е. кривая условно может быть разбита на три участка: два криволинейных (рис. 1, А и В) и один прямолинейный (рис. 1, Б).

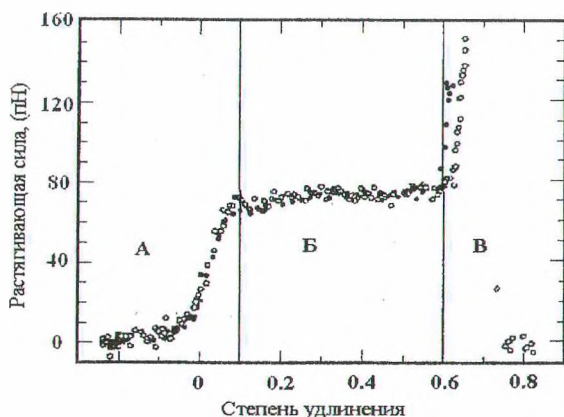


Рис. 1. Зависимость растягивающей силы от степени удлинения молекулы ДНК

Энергия конформационного возбуждения макромолекулы в рамках рассматриваемой модели может быть представлена в форме

$$E = \int \frac{dz}{2h} \left[M \left(\dot{u}^2 + S_1 u^2 \right) + \Phi(u) \right], \quad (1)$$

где S_1 — упругая постоянная, которая выражается через силовую константу растяжения-сжатия g_{tr} и определена в работе [6]; $\Phi(u)$ — дополнительная потенциальная функция структурного перехода между стабильными состояниями мономера; u — продольное перемещение пар оснований вдоль оси макромолекулы.

Уравнение движения для системы (1) в континуальном приближении имеет вид

$$\ddot{u} = S_1^2 u'' - \frac{1}{2M} \frac{\partial \Phi(u)}{\partial u} = S_1^2 u'' + \frac{1}{2M} F(u), \quad (2)$$

где $F(u)$ — растягивающая сила.

Для удобства записи перейдем от переменной u к относительной деформации ϵ , которые связаны между собой следующим соотношением:

$$u = \epsilon h,$$

где h — расстояние между парами оснований.

Сейчас следует рассмотреть возможность реализации в предлагаемой системе нелинейных волн солитонного типа. Для этого необходимо перейти к волновой переменной

$$\zeta = z - vt, \quad (3)$$

где v – скорость движения волны.

После замены переменной и однократного интегрирования уравнение (2) можно записать в форме

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\zeta}\right)^2 + Q(\varepsilon) = 0. \quad (4)$$

В выражении (4) функция $Q(u)$ имеет вид

$$Q(\varepsilon) = \frac{\Phi(\varepsilon) - C_1}{Mh(v^2 - S_1^2)}, \quad (5)$$

где C_1 – постоянная интегрирования.

Очевидно, что все возможные динамические режимы системы определяются уравнением (4). Это уравнение можно интерпретировать как закон сохранения энергии нелинейного осциллятора с эффективной потенциальной энергией (5).

Для вывода солитонных решений используем вид потенциальной функции $Q(\varepsilon)$ и запишем после разделения переменных интегральное уравнение

$$\int \frac{d\varepsilon}{\pm \sqrt{-Q(\varepsilon)}} = (\zeta - \zeta_0). \quad (6)$$

Очевидно (см. уравнение (6)), что необходимым и достаточным условием существования солитонных решений является выполнение неравенств, определяющих вид потенциальной функции $Q(\varepsilon)$.

Теоретическое значение растягивающей силы, описывающей экспериментальную ситуацию, было получено в работе [6] и имеет следующий вид:

$$F = F_0 \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \left(1 - \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \right) \left(1 - \frac{\varepsilon}{2\varepsilon_0} \right) + \mu \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} + k \right], \quad (7)$$

где ε_0 – начальная продольная деформация молекулы; F_0 , μ , k – коэффициенты, определенные в работе [6].

В последующем анализе для получения выражения для потенциала $Q(\varepsilon)$ учтем, что $F_p = \text{const}$ в области существования плато (рис 1, участок Б), а на остальных участках (А и В) воспользуемся выражением (8).

Решение интегрального уравнения (6) с учетом силовой функции (7) получено с помощью ЭВМ и имеет вид кинка (рис. 2) и антикинка (рис. 3).

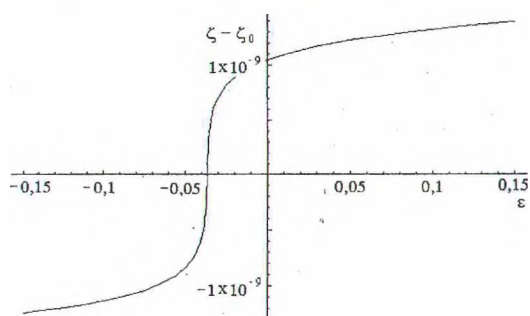


Рис. 2. Солитонное решение в виде кинка уравнения (6) на участке сверхрастяжения А

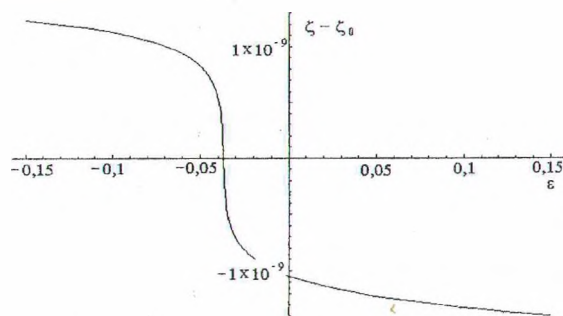


Рис. 3. Солитонное решение в виде антикинка уравнения (6) на участке сверхрастяжения А

Если в уравнении (8) положить константу $k = 0$, то кинк (рис. 4) и антикинк (рис. 5) сдвинутся в сторону оси ординат.

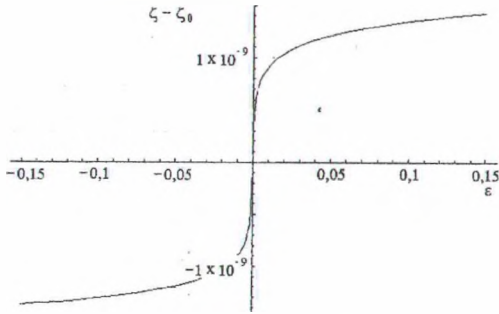


Рис. 4. Солитонное решение в виде кинка уравнения (6) на участке сверхрастяжения А при $k = 0$

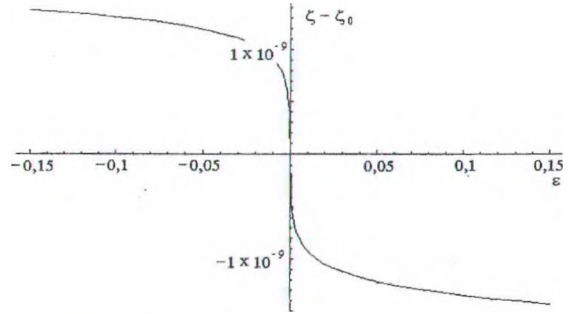


Рис. 5. Солитонное решение в виде антикинка уравнения (6) на участке сверхрастяжения А при $k = 0$

Решение интегрального уравнения (7) на участке плато (см. рис 2, Б) можно получить аналитически. Для этого определим явный вид функции $\Phi(\epsilon)$, учитывая, что $F_p = \text{const}$:

$$\Phi(\epsilon) = \int_{\epsilon_0}^{\epsilon} F(\epsilon) du = F_0 \epsilon. \quad (8)$$

Так как функция $\Phi(\epsilon)$ линейная по ϵ , то выберем за начало отсчета положение, когда $\Phi(\epsilon=0) = 0$. Следовательно, константа C_1 в выражении (5) равна нулю.

В итоге функцию $Q(\epsilon)$ можно записать следующим образом:

$$Q(\epsilon) = \frac{F_0 \epsilon}{Mh(v^2 - S_1^2)}.$$

Тогда интегральное уравнение (6) примет вид

$$\int \frac{\sqrt{Mh(-v^2 + S_1^2)} d\epsilon}{\pm \sqrt{F_0 \epsilon}} = (\zeta - \zeta_0), \quad (9)$$

а его решение получено в следующей форме:

$$\frac{\sqrt{Mh(-v^2 + S_1^2)}}{\pm \sqrt{F_0}} 2\sqrt{\epsilon} = (\zeta - \zeta_0). \quad (10)$$

Решения интегрального уравнения (6) на участке В, полученные с помощью ЭВМ, имеют вид, представленный на рис. 7 и 8.

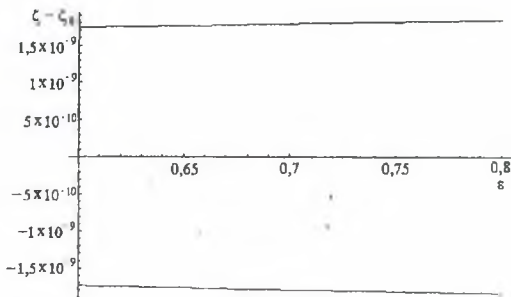


Рис. 6. Решение уравнения (6) на участке В сверхрастяжения молекулы ДНК ($k \neq 0$)

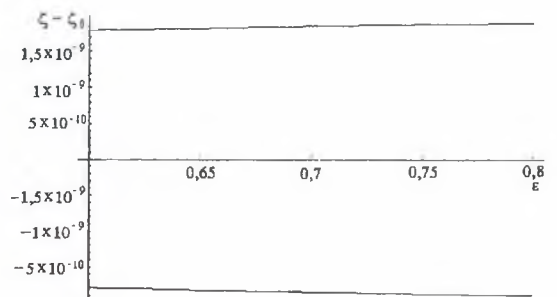


Рис. 7. Решение уравнения (6) на участке В сверхрастяжения молекулы ДНК ($k = 0$)

Таким образом, показано, что деформационные возбуждения могут распространяться вдоль сверхрастянутой молекулы ДНК в виде волн, представленных на рис. 2 – 7.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kamlyuk A.N., Nemtsov V.B. Effect of ion concentration on soliton propagation along DNA molecules // *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*. –2001. –V. 4, N. 4. – P. 370–375.
2. Камлюк А.Н., Немцов В.Б. Распространение солитонных возбуждений в растянутых одиночных молекулах ДНК фага λ в различных ионных условиях // *Труды БГТУ*. – 2002. Сер. VI. Физ.-мат. науки и информ. Вып. IX. – С. 46–52.
3. Haijun Zhou, Yang Zhang and Zhong-can Ou-Yang Elastic property of single double-stranded DNA molecules: Theoretical study and comparison with experiments // *Phys. Rev. E*. – 2000. – V. 62, N. 1. – P. 1045–1058.
4. Baumann G. et al. Stretching of single collapsed DNA molecules // *Biophys. J.* –2000. – V. 78. – P. 1965–1978.
5. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. – М.: Мир, 1987.
6. Nemtsov V.B, Kamlyuk A.N. Evaluation of the force constant of a DNA molecule using its model in the form of coil springs. // *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. – 2001. –V. 74, N. 5. – P. 1253–1261.
7. Немцов В.Б., Ширко А.В. Камлюк А. Н. Построение модели сверхрастяжения молекулы ДНК // *Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. Вып. XI. 2003.* – С. 45–50.