

В.В. Белов, доцент; В.Б. Немцов, профессор

СТАТИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СВЕРХРАСТЯЖЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ ДНК

The statistical two-state model is used for description of the nonlinear phenomena of the DNA molecule overstretching.

Одной из актуальных проблем биофизики молекулы ДНК является описание и объяснение феномена ее упругого сверхрастяжения, когда исходная длина молекулы под действием растягивающих сил увеличивается в 1,5 – 2 раза, а на диаграмме растяжения появляется характерное плато. Указанное явление обнаружено в результате уникальных опытов по растяжению одиночной молекулы ДНК с помощью техники лазерных пинцетов (см. [1]).

Рассмотрим простую модель, в которой молекула ДНК имеет вид цепочки, образованной N одномерными элементами, расположенными вдоль прямой линии [2]. Будем считать, что каждый элемент может находиться в одном из двух состояний. В первом случае он имеет длину a и энергию E_a , во втором случае соответствующие величины равны b и E_b . К обоим концам молекулы приложены одинаковые по величине и противоположно направленные силы F . Если N_a элементов находятся в первом состоянии и $N_b = N - N_a$ элементов – во втором, то энергия молекулы равна

$$E(N_a, N_b) = N_a E_a + N_b E_b, \quad (1)$$

а ее длина –

$$L(N_a, N_b) = N_a a + N_b b. \quad (2)$$

Вероятность обнаружения молекулы в одном из состояний, характеризующихся числами N_a и N_b при заданном натяжении F , имеет вид

$$P(N_a, N_b) = Q^{-1} \exp\{-\beta(E(N_a, N_b) - FL(N_a, N_b))\}. \quad (3)$$

Здесь $\beta = 1/k_B T$; k_B – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура.

Число состояний, имеющих одни и те же значения N_a и N_b , равно числу способов, которыми оба состояния могут быть распределены среди N элементов, т. е. равно $N! / N_a! N_b!$. В соответствии с этим конфигурационный интеграл определяется формулой

$$\begin{aligned} Q &= \sum_{N_a=0}^N \frac{N!}{N_a! N_b!} \exp\{-\beta(E(N_a, N_b) - FL(N_a, N_b))\} = \\ &= \sum_{N_a=0}^N \frac{N!}{N_a! N_b!} \exp\{-\beta[N_a(E_a - Fa) + N_b(E_b - Fb)]\} = \\ &= \{\exp[\beta(Fa - E_a)] + \exp[\beta(Fb - E_b)]\}^N. \end{aligned} \quad (4)$$

Поэтому среднее значение длины молекулы равно

$$\bar{L} = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Q}{\partial F} \right)_{T, N} \quad (5)$$

Будем считать, что первое состояние связано с ориентацией звеньев цепи и энергия его в случае непрерывного распределения определяется формулой

$$U_a = \frac{\xi}{2\beta} \int_{(L)} \left(\frac{d\tau}{d\sigma} \right)^2 d\sigma, \quad (6)$$

где τ – единичный вектор касательной к кривой; σ – длина дуги; ξ – персистентная длина молекулы. Используем последнее выражение для дискретного распределения элементов, заменив производную от единичного вектора касательной конечным изменением

$$\frac{d\tau}{d\sigma} \rightarrow \frac{\tau_k - \tau_{k-1}}{b_0}, \quad (7)$$

где b_0 – длина одного звена в естественном состоянии, а интеграл – суммой. Тогда

$$\begin{aligned} \beta U_a &= \frac{\xi}{2b_0} \sum_{k=1}^{N_a} (\tau_k - \tau_{k-1})^2 = \\ &= K \sum_{k=1}^{N_a} [1 - \cos \vartheta_k \cos \vartheta_{k-1} - \sin \vartheta_k \sin \vartheta_{k-1} \cos(\varphi_k - \varphi_{k-1})] \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь $K = \xi / b_0$, ϑ и φ – углы, определяющие ориентацию соответствующего элемента. Считая распределение по φ равномерным, а по ϑ для всех элементов одинаковым, усредним последнее выражение по ориентациям ближайшего соседа, в результате чего получим

$$\beta U_a = N_a K (1 - \cos \vartheta < \cos \vartheta >) \quad (9)$$

Сместим уровень отсчета U_a на константу из правой части и отнесем полученную энергию к одному элементу:

$$\beta u_a = -K < \cos \vartheta > \cos \vartheta = -Ks \cos \vartheta \quad (10)$$

Здесь $s = < \cos \vartheta >$ – параметр порядка. Ее среднее значение отождествим с E_a , т.е.

$$\beta E_a = \beta < u_a > = -Ks < \cos \vartheta > = -Ks^2 \quad (11)$$

В качестве функции распределения по ϑ используем выражение

$$f_a(\vartheta) = C_a \exp[\beta(\mathbf{F} \cdot \mathbf{b}_0 - u_a)] = C_a \exp[(\beta F b_0 + Ks) \cos \vartheta], \quad (12)$$

где константа C_a определяется из условия нормировки

$$\int_0^\pi f_a(\vartheta) \sin \vartheta d\vartheta = 1 \quad (13)$$

Подставив (12) в (13), будем иметь

$$C_a^{-1} = \int_0^\pi \exp[(\beta F b_0 + K s) \cos \vartheta] \sin \vartheta d\vartheta = \frac{1}{K_1} [\exp(K_1) - \exp(-K_1)]$$

Здесь введено обозначение

$$K_1 = \beta F b_0 + K s \quad (14)$$

Тогда

$$s = \langle \cos \vartheta \rangle = C_a \int_0^\pi \cos \vartheta \exp(K_1 \cos \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta = \frac{\exp(K_1) + \exp(-K_1)}{\exp(K_1) - \exp(-K_1)} - \frac{1}{K_1} \quad (15)$$

Таким образом, параметр порядка определяется трансцендентным уравнением (15).

Второе состояние определяется деформацией (растяжением–сжатием) элементов молекулы ДНК, энергия которой в линейном приближении определяется соотношением

$$u_b = \frac{c \varepsilon^2}{2}, \quad (16)$$

где ε – относительное удлинение элемента; $c = E S b_0$; E – модуль упругости; S – площадь поперечного сечения молекулы. Среднее значение энергии деформации отождествим с E_b , т.е. $E_b = \langle u_b \rangle$.

Функцию распределения по деформациям выберем в виде

$$f_b(\varepsilon) = C_b \exp[\beta(F b_0 \varepsilon - u_b)] = C_b \exp\left[\beta\left(F b_0 \varepsilon - \frac{c \varepsilon^2}{2}\right)\right] \quad (17)$$

Нормировочный коэффициент определяется из условия

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_b(\varepsilon) d\varepsilon = 1 \quad (18)$$

и равен

$$C_b = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \exp(-\alpha \delta^2) \quad (19)$$

Тогда

$$\beta E_b = \frac{1}{2} + \frac{\gamma^2}{2\beta c}, \quad (20)$$

где

$$\alpha = \beta c / 2, \quad \gamma = \beta F b_0, \quad \delta = \gamma / 2\alpha. \quad (21)$$

Параметр длины a , связанный с ориентацией элемента, зададим в виде

$$a = b_0 s, \quad (22)$$

а параметр b , связанный с деформацией, определим соотношением

$$b = b_0 (1 + \bar{\varepsilon}), \quad (23)$$

где $\bar{\varepsilon}$ – среднее относительное удлинение элемента. Оно определяется формулой

$$\begin{aligned}
\bar{\varepsilon} &= \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon f_b(\varepsilon) d\varepsilon = C_b \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon \exp \left[\beta \left(F b_0 \varepsilon - \frac{c \varepsilon^2}{2} \right) \right] d\varepsilon = \\
&= C_b \exp(\alpha \delta^2) \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon \exp[-\alpha(\varepsilon - \delta)^2] d\varepsilon = \\
&= C_b \exp(\alpha \delta^2) \int_{-\infty}^{\infty} (x + \delta) \exp(-\alpha x^2) dx = \delta = \frac{\gamma}{\beta c}.
\end{aligned} \quad (24)$$

Таким образом, выражение для конфигурационного интеграла (4) приобретает вид

$$\begin{aligned}
Q &= \left\{ \exp[\gamma s + K s^2] + \exp \left[\gamma(1 + \bar{\varepsilon}) - \frac{1}{2} - \frac{\gamma^2}{2\beta c} \right] \right\}^N = \\
&= \left\{ \exp[\gamma s + K s^2] + \exp \left[\gamma \left(1 + \frac{\gamma}{2\beta c} \right) - \frac{1}{2} \right] \right\}^N.
\end{aligned} \quad (25)$$

Подставив последнее выражение в (5), получим

$$\begin{aligned}
\bar{L} &= \frac{N}{\beta} \frac{1}{\exp[\gamma s + K s^2] + \exp \left[\gamma \left(1 + \frac{\gamma}{2\beta c} \right) - \frac{1}{2} \right]} \times \\
&\times \left\{ (\gamma' s + \gamma s' + 2K s s') \exp(\gamma s + K s^2) + \gamma' \left(1 + \frac{\gamma}{\beta c} \right) \exp \left[\gamma \left(1 + \frac{\gamma}{2\beta c} \right) - \frac{1}{2} \right] \right\}.
\end{aligned} \quad (26)$$

Штрихом здесь обозначена производная по растягивающей силе F .

Производную от s найдем с помощью выражений (15) и (14):

$$s' = \frac{\beta b_0 D}{1 - KD}, \quad (27)$$

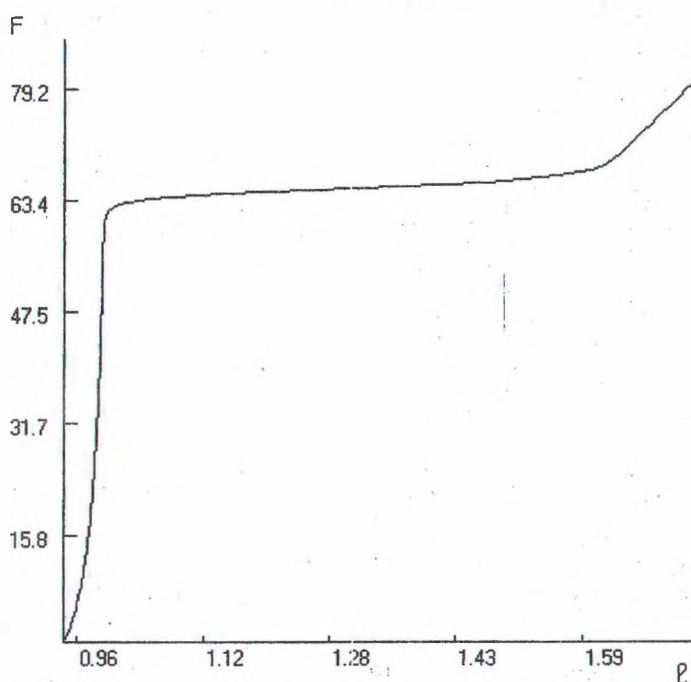
где

$$D = K_1^{-2} - \frac{4 \exp(-2K_1)}{[1 - \exp(-2K_1)]^2}. \quad (28)$$

Из определения (21) следует, что

$$\gamma' = \beta b_0. \quad (29)$$

Подставив (27)–(29) в (26), можно рассчитать зависимость относительной средней длины, приходящейся на один элемент $l = \bar{L} / N b_0$, от растягивающего усилия F . Расчеты были проведены при следующих значениях параметров, характерных для молекулы ДНК: $T = 300^\circ \text{C}$, $\xi = 500 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, $b_0 = 10,2 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, $E = 3,5 \cdot 10^8 \text{ Н/м}^2$, $S = \pi \cdot 10^{-18} \text{ м}^2$. На рисунке представлена рассчитанная кривая, находящаяся во вполне удовлетворительном соответствии с экспериментальными результатами [3]. Отличие поведения рассчитанной кривой на правом краю обусловлено использованием линейного приближения теории упругости, хотя даже в этом случае проявляются нелинейные эффекты.



Рисунок

ЛИТЕРАТУРА

1. Clusel P. et al. DNA: An extensible Molecule // Science. 1996. V.271. P.791–795.
2. Кубо Р. Статистическая механика. – М.: Мир, 1967.
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.

УДК 537.633

В.Р. Соболев, вед. науч. сотрудник; О.Н. Мазуренко, науч. сотрудник;
Н.В. Францкевич, преподаватель

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ВЕРОЯТНОСТИ ПРИМЕСНОГО РАССЕЯНИЯ БЛОХОВСКОГО ЭЛЕКТРОНА

Influence of superposition of transition amplitudes in intermediate states on probability of electron-impurity scattering is analyzed. The scale of the nonlinear concentration inclusion is determined during a relaxation from off-diagonal matrix elements of energy of interaction.

В ряде случаев применение понятия волнового пакета позволяет представлять электроны как классические частицы, которые имеют и координату r , и квазиимпульс p . Электронные явления в таком приближении рассматривают, используя неравновесную функцию распределения f в фазовом пространстве p и r . Полное изменение f с течением времени выражается производной df/dt и происходит из-за столкновений частицы с другими электронами, фононами и дефектами кристаллической структуры,