При низкой концентрации моновалентной соли (менее 10 мМ Na^+) в присутствии трехвалентных катионов гексаамина кобальта III (CoHex) жесткости на изгиб и кручение остова значительно меньше, чем в присутствии катионов спермидина$^{3+}$. Это свидетельствует о том, что гексаамин кобальта III (CoHex) является более сильным конденсирующим агентом по сравнению со спермидином.

Таким образом, видно, что упругие характеристики молекулы ДНК существенно зависят от ионного окружения. Поэтому этот фактор необходимо учитывать при моделировании статики деформированного состояния молекулы ДНК, а также ее динамики.

ЛИТЕРАТУРА

1. 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, N1.–P.1045–1058.

2. Kamien R.D., Lubensky T. C., Nelson P., O'Hern C.S. Direct determination f DNA twist-stretch coupling // Europhys. Lett.–1997.–V.38, N3.–P.237–242.

3. 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.

4. Немцов В.Б. Неравновесная статистическая механика систем с ориентационным порядком. Мн.: Тэхналогія, 1997.–278 с.

5. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. М.: Мир, 1987. –584 с.

6. Феодосьев В. И. Избранные задачи и вопросы по сопротивлению материалов. М.: Наука, 1973.–400 с.

7. Феодосьев В. И. Сопротивление материалов. М.: Наука, 1986.–512 с.

8. Тимошенко С. П. Сопротивление материалов. Т.2. М.: Наука, 1965.

9. Baumann G. et al. Stretching of single collapsed DNA molecules // Biophys. J.–2000.–V. 78.– P. 1965–1978.

10. Hagerman P.J. Flexibility of DNA // Ann. Rev. Biophys. Biophys. Chem.–1988.–V.17.– P. 265–286.

УДК 536.758

А.Н. Камлюк, ассистент

НИЗКОЧАСТОТНЫЕ КОЛЕБАНИЯ МОЛЕКУЛЫ ДНК В ВЯЗКОМ РАСТВОРЕ

The dynamics of low-frequency vibrations of double-stranded DNA molecules in a viscous fluid is investigated. The structure of the low-frequency macromolecule vibration spectrum is determined.

Исследование низкочастотных колебаний (ω<200 $см^{-1}$) молекулы ДНК представляет значительный интерес. Такие колебания, как правило, охватывают всю структуру молекулы ДНК и характеризуют ее конформационное состояние в целом. В результате этого низкочастотные колебания могут играть важную роль в актах биологического функционирования биополимера.

В недавней работе [1] сообщалось, что амплитуды смещений оснований в молекуле ДНК, полученные экспериментально, меньше по сравнению с их теоретическими

оценками и что деформирование молекулы сильно ограничено из-за сил трения, налагаемых средой.

Поэтому одним из центральных аспектов конформационной динамики ДНК в настоящее время является исследование подвижности ее структурных элементов с учетом влияния внешнего окружения.

В настоящей работе в рамках феноменологического подхода рассмотрены низкочастотные колебания молекулы ДНК в вязком растворе.

1. Уравнения движения

Рассмотрим молекулу ДНК в вязком растворе при комнатной температуре.

Для описания различных типов подвижности структурных элементов макромолекулы ДНК, подробно описанных в работе [2], может быть использована модель четырех масс: две массы нуклеозидов и две массы фосфатных групп остова. Причем массы остова (m_0) гомогенны вдоль цепи макромолекулы, а массы нуклеозидов (m_i) различны, так как включают массы нуклеиновых оснований. Здесь индекс i =1, 2 нумерует цепи двойной спирали.

Так как нуклеозид не является жестким, то примем за переменную, определяющую внутринуклеозидную подвижность, величину $\rho_i = \ell - \ell_i$. Здесь ℓ – равновесная для данной конформации двойной спирали, приведенная длина нуклеозида, а ℓ_i – ее текущее значение. Наряду со смещениями n-го нуклеозида и остова вдоль осей OX, OY и OZ (U_n, V_n, W_n соответственно) учтем также качания нуклеозида вокруг цепей остова, описываемые углами θ_i.

Для упрощения дальнейших расчетов введем новые переменные:

$$U = U_1 + U_2;\ V = V_1 + V_2;\ W = W_1 + W_2;\ \theta = \theta_1 + \theta_2;\ \rho = \rho_1 + \rho_2;$$

$$u = U_1 - U_2;\ v = V_1 - V_2;\ w = W_1 - W_2;\ \xi = \theta_1 - \theta_2;\ \eta = \rho_1 - \rho_2.$$

Если полагать, что мономеры имеют параметры и массы, соответствующие усредненным по нуклеотидному содержанию значениям $\ell_0 = \langle \ell_{0i} \rangle$, $\theta_0 = \langle \theta_{0i} \rangle$, $M = \langle M_i \rangle$, $m = \langle m_i \rangle$, то выражение для энергии конформационных возбуждений макромолекулы согласно [2] примет вид

$$E = \int \frac{dz}{4h} [M(\dot{U}^2 + \dot{u}^2 + \dot{V}^2 + \dot{v}^2 + \dot{W}^2 + \dot{w}^2) + m(\ell^2(\dot{\theta}^2 + \dot{\xi}^2) + \dot{\rho}^2 +$$

$$+ \dot{\eta}^2 + 2\ell_a(\dot{\theta}\dot{U} + \dot{\xi}\dot{u}) + 2\ell_b(\dot{\theta}\dot{V} + \dot{\xi}\dot{v}) + 2b(\dot{\rho}\dot{U} + \dot{\eta}\dot{u}) - 2a(\dot{\rho}\dot{V} + \dot{\eta}\dot{v})) +$$

$$+ \{2\alpha(\ell_a\theta + U + b\rho)^2 + \beta(\theta^2 + \xi^2) + \varepsilon(\rho^2 + \eta^2) + fh^2((\theta')^2 + (\xi')^2) +$$

$$+ g_1h^2((U')^2 + (u')^2) + g_2h^2((V')^2 + (v')^2) + g_3h^2((\rho')^2 + (\eta')^2) +$$

$$+ ch^2((W')^2 + (w')^2) + \tau h^2(W\theta' + w'\xi')\}]. \qquad (1)$$

Здесь α, β, ε, f, g, c, τ – силовые постоянные; штрихом отмечается дифференцирование по z, точка означает дифференцирование по времени; $a = \sin\theta_0$; $b = \cos\theta_0$; $\ell_a = \ell\sin\theta_0$; $\ell_b = \ell\cos\theta_0$. Остальные обозначения соответствуют обозначениям работы [2].

Известно, что азотистые основания молекулы ДНК в достаточной степени хорошо защищены от водного окружения [3], поэтому растворитель непосредственно влияет только на сахаро-фосфатный остов. Этот факт примем во внимание при дальнейшем моделировании.

Влияние среды учтем с помощью сил сопротивления

$$Q = \int \frac{dz}{h}\left(-\frac{\partial \Phi}{\partial \dot{q}}\right),$$

где $\Phi = \Phi(\dot{q}_1, \dot{q}_2, \ldots, \dot{q}_n)$ – диссипативная функция рассеивания Релея, которая является функцией обобщенных скоростей.

При линейных по скорости силах сопротивления эта функция имеет следующий вид:

$$\Phi = \frac{1}{2}\sum \mu \dot{q}_i^{\,2}.$$

Здесь μ – коэффициент демпфирования, который определим по формуле Стокса

$$\mu = 6\pi\eta\sigma,$$

где η – вязкость растворителя, σ – гидродинамический радиус молекулы сахара, входящей в состав остова ДНК и непосредственно контактирующей с вязкой средой.

В итоге диссипативная функция Φ примет следующий вид:

$$\Phi = \frac{1}{4}\mu(\dot{U}^2 + \dot{u}^2 + \dot{V}^2 + \dot{v}^2 + \dot{W}^2 + \dot{w}^2). \qquad (2)$$

Используя выражения для энергии (1) и диссипативной функции (2), с помощью формализма Лагранжа-Эйлера приходим к системам линейных дифференциальных уравнений относительно введенных переменных:

$$\begin{cases} g_1 h^2 U'' - M\ddot{U} - m(\ell_a \ddot{\theta} + b\ddot{\rho}) - 2\alpha(\ell_\alpha \theta + U + b\rho) = \mu\dot{U} \\ g_2 h^2 V'' - M\ddot{V} - m(\ell_b \ddot{\theta} - a\ddot{\rho}) = \mu\dot{V} \\ ch^2 W'' - M\ddot{W} + \tau_\alpha h^2 \theta'' = \mu\dot{W} \\ fh^2\theta'' - m\ell^2\ddot{\theta} + \tau_\alpha h^2 W'' - m(\ell_a \ddot{U} + \ell_b \ddot{V}) - 2\alpha\ell_a(\ell_\alpha\theta + U + b\rho) - \beta\dot{\theta} = 0 \\ g_3 h^2 \rho'' - m\ddot{\rho} - m(b\ddot{U} - a\ddot{V}) - 2\alpha b(\ell_\alpha\theta + U + b\rho) - \varepsilon\rho = 0 \end{cases}, \qquad (3)$$

$$\begin{cases} g_1 h^2 u'' - M\ddot{u} - m(\ell_a \ddot{\xi} + b\ddot{\eta}) = \mu\dot{u} \\ g_2 h^2 v'' - M\ddot{v} - m(\ell_b \ddot{\xi} - a\ddot{\eta}) = \mu\dot{v} \\ ch^2 w'' - M\ddot{w} + \tau_\alpha h^2 \xi'' = \mu\dot{w} \\ fh^2\xi'' - m\ell^2\ddot{\xi} + \tau_\alpha h^2 w'' - m(\ell_a \ddot{u} + \ell_b \ddot{v}) - \beta\xi = 0 \\ g_3 h^2 \eta'' - m\ddot{\eta} - m(b\ddot{u} - a\ddot{v}) - \varepsilon\eta = 0 \end{cases}, \qquad (4)$$

где обозначено $\tau_\alpha = \tau/2$.

Как видно из (3) и (4), первая система переходит во вторую при $\alpha \to 0$. Поэтому фактически достаточно изучить решения первой системы, а затем, приравнивая α к нулю, получим соответствующие результаты для второй.

2. Влияние вязкого окружения на низкочастотные колебания

Нормальные колебания системы можно исследовать, отыскивая решения уравнений (3) и (4) в виде плоской волны: $r = \tilde{r}\exp[I(\omega\ t - k\ z)]$.

Здесь $\tilde{r}$ – амплитуда рассматриваемой переменной; ω – циклическая частота; k – волновой вектор.

Из уравнений (3) и (4) следуют дисперсионные соотношения, определяющие спектр колебаний макромолекулы:

$$\omega^{10} + \omega^{9} p_9 - \omega^{8}\left[\frac{M}{m_0}(\alpha_0 + \beta_0 + \varepsilon_0) + k^2 h_1^2 + p_8\right] + \omega^{7}[k^2 h_{\mu 1}^2 + p_7] +$$

$$+ \omega^{6}\left[\frac{M^2}{m_0^2}(\alpha_0\beta_0 p + \alpha_0\varepsilon_0 q + \beta_0\varepsilon_0) + k^2(h_2^2 + h_{\mu 2}^2) + k^4 h_3^4 + p_6\right] +$$

$$+ \omega^{5}[k^2 h_{\mu 3}^2 + k^4 h_4^4 + p_5] - \omega^{4}\left[\frac{M^2 m}{m_0^3}\alpha_0\beta_0\varepsilon_0 + k^2(h_4^2 + h_{\mu 5}^2) + \right. \tag{5}$$

$$\left. + k^4(h_5^4 + h_{\mu 6}^4) + k^6 h_6^6 + p_4\right] + \omega^{3}[k^2 h_{\mu 7}^2 + k^4 h_{\mu 8}^4 + k^6 h_{\mu 9}^6 + p_3] +$$

$$+ \omega^{2}[k^2(h_7^2 + h_{\mu 1}^2) + k^4(h_8^4 + h_{\mu 11}^4) + k^6(h_9^6 + h_{\mu 12}^6) + k^8 h_{10}^8 + p_2] +$$

$$+ \omega[k^2 h_{\mu 13}^2 + k^4 h_{14}^4 + k^6 h_{\mu 15}^6 + k^8 h_{\mu 16}^8] = k^4 h_{11}^4 + k^6 h_{12}^6 + k^8 h_{13}^8 + k^{10} h_{14}^{10}$$

и

$$\omega^{10} + \omega^{9} p_9 - \omega^{8}\left[\frac{M}{m_0}(\beta_0 + \varepsilon_0) + k^2 h_1^2 + p_8\right] + \omega^{7}[k^2 h_{\mu 1}^2 + p_{10}] +$$

$$+ \omega^{6}\left[\frac{M^2}{m_0^2}\beta_0\varepsilon_0 + k^2(h_{15}^2 + h_{\mu 2}^2) + k^4 h_3^4 + p_{11}\right] +$$

$$+ \omega^{5}[k^2 h_{\mu 17}^2 + k^4 h_{\mu 4}^4 + p_{12}] - \omega^{4}\left[\frac{M^2 m}{m_0^3}\alpha_0\beta_0\varepsilon_0 + k^2(h_{16}^2 + h_{\mu 18}^2) + \right.$$

$$\left. + k^4(h_{17}^4 + h_{\mu 6}^4) + k^6 h_6^6 + p_{13}\right] + \omega^{3}[k^2 h_{\mu 19}^2 + k^4 h_{\mu 20}^4 + k^6 h_{\mu 9}^6 + p_{14}] + \tag{6}$$

$$+ \omega^{2}[k^2(h_7^2 + h_{\mu 21}^2) + k^4(h_8^4 + h_{\mu 22}^4) + k^6(h_9^6 + h_{\mu 12}^6) + k^8 h_{10}^8] +$$

$$+ \omega[k^4 h_{\mu 23}^4 + k^6 h_{\mu 24}^6 + k^8 h^8{}_{\mu 16}] = k^6 h_{20}^6 + k^8 h_{21}^8 + k^{10} h_{14}^{10},$$

где коэффициенты $h_1 \ldots h_{21}$, $h_{\mu 1} \ldots h_{\mu 25}$ и $p_2 \ldots p_{13}$ являются функциями следующих переменных: α, β, ε, c, τ, g_1, g_2, g_3, h, M, m, θ_0, ℓ, μ. Вид этих фddункций устанавливается при получении соотношений (5) и (6).

Явные выражения для коэффициентов уравнений (5) и (6) в данной работе не приводятся в связи с их громоздкостью.

В длинноволновом приближении ($k\to 0$) из уравнений (3) и (4) получены следующие дисперсионные соотношения:

$$\omega^2\{\omega^8+\omega^7 p_9-\omega^6\left[\frac{M}{m_0}(\alpha_0+\beta_0+\varepsilon_0)+p_8\right]+\omega^5[p_7]+$$
$$+\omega^4\left[\frac{M^2}{m_0^2}(\alpha_0\beta_0 p+\alpha_0\varepsilon_0 q+\beta_0\varepsilon_0)+p_6\right]+\omega^3[p_5]- \qquad (7)$$
$$-\omega^2\left[\frac{M^2 m}{m_0^3}\alpha_0\beta_0\varepsilon_0+p_4\right]+\omega\ [p_3]+p_2\}=0$$

и

$$\omega^3\{\omega^7+\omega^6 p_9-\omega^5\left[\frac{M}{m_0}(\beta_0+\varepsilon_0)+p_8\right]+\omega^4[p_{10}]+\omega^3\left[\frac{M^2}{m_0^2}\beta_0\varepsilon_0+p_{11}\right]+$$
$$+\omega^2[p_{12}]-\omega\left[\frac{M^2 m}{m_0^3}\alpha_0\beta_0\varepsilon_0+p_{13}\right]+p_{14}\}=0. \qquad (8)$$

Здесь используются обозначения $\alpha_0=2\alpha m_0/Mm$; $\beta_0=\beta/m\ell^2$; $\varepsilon_0=\varepsilon/m$; $m_0=M-m$; $q=a^2+mb^2/M$; $p=b^2+ma^2/M$.

Если пренебречь вязкостью среды ($\mu\to 0$), то выражение (7) примет вид

$$\omega^4[\omega^6-\omega^4\frac{M}{m_0}(\alpha_0+\beta_0+\varepsilon_0)+\omega^2\frac{M^2}{m_0^2}(\alpha_0\varepsilon_0 q+\alpha_0\beta_0 p+\beta_0\varepsilon_0)- \qquad (9)$$
$$-\frac{M^2 m}{m_0^3}\alpha_0\beta_0\varepsilon_0]=0,$$

а выражение (8) записывается как

$$\omega^6\left(\omega^2-\varepsilon_0\frac{M}{m_0}\right)\left(\omega^2-\beta_0\frac{M}{m_0}\right)=0, \qquad (10)$$

что полностью соответствует данным, представленным в работе [2].

Согласно полученным результатам, в модели четырех масс в общем случае реализуются пять ветвей колебаний оптического типа и пять – акустического.

Принимая во внимание усредненные параметры модели согласно данным работ [4, 5] ($\ell\approx 0{,}49$ нм, $\theta_0\approx 34°$, $m=289$ а.е.м., $M=513$ а.е.м.), можно показать, что для макромолекул типа ДНК выполняются соотношения $p\approx 1$ и $m/qM\approx 1$.

Поэтому выражения для оптических частот в длинноволновом пределе без учета вязкого окружения имеют вид

$$\omega_{1,2}^2 = \frac{M}{2m_0}\left[\varepsilon_0 + \alpha_0 \pm \sqrt{(\varepsilon_0 + \alpha_0)^2 - 4q\alpha_0\varepsilon_0}\right],$$

$$\omega_3^2 \approx \omega_5^2 = \frac{M}{m_0}\beta_0, \tag{11}$$

$$\omega_4^2 = \frac{M}{m_0}\varepsilon_0.$$

Влияние вязкого окружения исследуем сначала путем анализа движения мономеров в предположении абсолютной жесткости структурных элементов молекулы ДНК.

В этом случае уравнения (3) и (4) записываются в форме

$$\begin{cases} g_1 h^2 U'' - m_0 \ddot{U} - 2\alpha U = \mu \dot{U} \\ g_2 h^2 V'' - m_0 \ddot{V} = \mu \dot{V} \\ ch^2 W'' - m_0 \ddot{W} = \mu \dot{W} \end{cases}, \tag{12}$$

$$\begin{cases} g_1 h^2 u'' - m_0 \ddot{u} = \mu \dot{u} \\ g_2 h^2 v'' - m_0 \ddot{v} = \mu \dot{v} \\ ch^2 w'' - m_0 \ddot{w} = \mu \dot{w} \end{cases}. \tag{13}$$

Если искать решение системы уравнений (12) в виде плоской волны, то придем к следующим дисперсионным соотношениям:

$$\begin{aligned} m_0(\omega^U)^2 - g_1 h^2 (k^U)^2 - 2\alpha - \mu I \omega^U &= 0, \\ m_0(\omega^V)^2 - g_2 h^2 (k^V)^2 - \mu I \omega^V &= 0, \\ m_0(\omega^W)^2 - ch^2 (k^W)^2 - \mu I \omega^W &= 0, \end{aligned} \tag{14}$$

а для уравнений системы (13)

$$\begin{aligned} m_0(\omega^u)^2 - g_1 h^2 (k^u)^2 - \mu I \omega^u &= 0, \\ m_0(\omega^v)^2 - g_2 h^2 (k^v)^2 - \mu I \omega^v &= 0, \\ m_0(\omega^w)^2 - ch^2 (k^w)^2 - \mu I \omega^w &= 0, \end{aligned} \tag{15}$$

где верхний индекс у частот колебаний указывает на их принадлежность к соответствующему перемещению. Существенно, что системы уравнений превратились в системы независимых уравнений.

При этом в длинноволновом приближении имеем

$$\begin{aligned} m_0(\omega^U)^2 - 2\alpha - \mu I \omega^U &= 0, \\ m_0(\omega^V)^2 - \mu I \omega^V &= 0, \\ m_0(\omega^W)^2 - \mu I \omega^W &= 0, \end{aligned} \tag{16}$$

$$m_0(\omega^u)^2 - \mu I\omega^u = 0,$$
$$m_0(\omega^v)^2 - \mu I\omega^v = 0, \qquad (17)$$
$$m_0(\omega^w)^2 - \mu I\omega^w = 0.$$

Выражения для частот длинноволновых колебаний оптического типа из соотношений (16) принимают вид

$$\omega_{1,2}^U = \frac{I}{2}(\gamma \pm \sqrt{\gamma^2 - 4\omega_0^2}), \quad \omega_1^{V,W} = I\gamma, \quad \omega_2^{V,W} = 0, \qquad (18)$$

а для соотношений (17) получаем соответственно

$$\omega_1^{u,v,w} = I\gamma, \quad \omega_2^{u,v,w} = 0 \qquad (19)$$

Здесь $\omega_0 = \sqrt{\frac{2\alpha}{m_0}}$ – частота собственных колебаний.

Из анализа выражений для частот (18) и (19) становится очевидным, что при $\gamma^2 > 4\omega_0^2$ рассматриваемые моды описывают движения передемпфированного осциллятора с одной степенью свободы. Моды *V*, *W*, *u*, *v*, *w* описывают неколебательное затухание соответствующих смещений.

В свою очередь, в системе возможны колебания структурных элементов молекулы ДНК при условии, что $\gamma^2 < 4\omega_0^2$.

Расчет частот, отвечающих уравнениям (3) и (4) в длинноволновом пределе с учетом вязкости среды и внутренних перемещений структурных элементов, представлен на рисунках 1 и 2. При этом следует отметить, что изменение вязкости (см. рис.1 и рис. 2) может осуществляться за счет изменения состава раствора и его температуры, а также путем соответствующей замены растворителя.

Как видно из рисунка 1, частоты колебаний структурных элементов молекулы ДНК ω_1, ω_3, ω_4 и ω_5 в режиме осцилляции снижаются при увеличении вязкости среды по сравнению с их значениями при μ=0 и стремятся к своим установившимся значениям. Частота ω_2 соответствует чистому затуханию. Эта частота характеризует внешние колебания структурных элементов молекулы ДНК вдоль оси спирали.

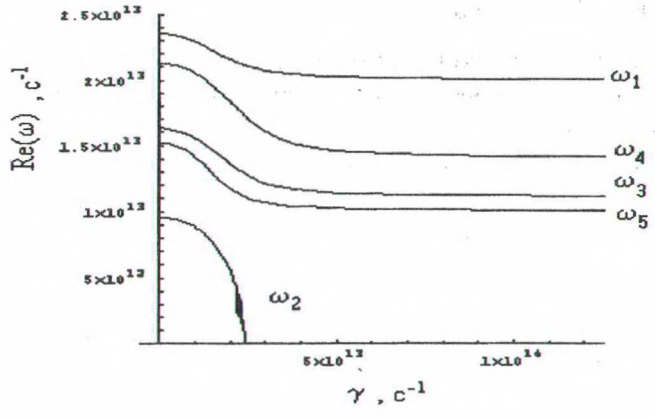

Рис. 1. Зависимость действительной части частот от приведенной константы демпфирования

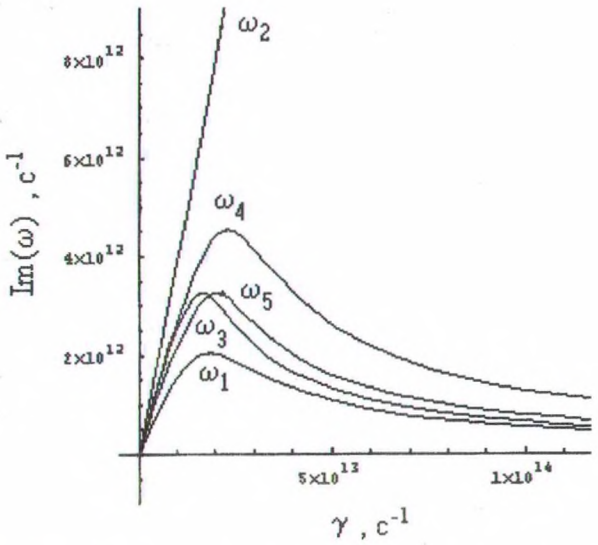

Рис. 2. Зависимость мнимой части частот от приведенной константы демпфирования

Указанные свойства являются следствием экранирования оснований остовом, что приводит к выводу о том, что остов играет существенную роль в моделировании динамики двухцепочечной ДНК в растворе.

На рисунке 2 представлена зависимость частот колебаний структурных элементов молекулы ДНК для режима затухания от приведенного коэффициента демпфирования.

Таким образом, в данной работе показано, что вязкость растворителя оказывает существенное влияние на динамику низкочастотных движений в молекуле ДНК. В этой связи следует отметить, что путем изменения вязких свойств окружающей среды можно перейти к особым конфигурациям оснований, которые возникают при добавлении в среду определенных ферментов. Так экспериментально можно исследовать влияние, например, взаимодействия белков или лекарственных препаратов с молекулой ДНК. Это может иметь значение при регуляции генов.

Изменение вязкости в окружении ДНК может иметь место во время процессов, идущих в ядре при делении клетки. Также можно заметить, что избирательная активация генов чувствительна к небольшим изменениям в окружающей среде при упаковке ДНК в хромосоме. Это предполагает, что вовлеченные в этот процесс конформационные различия малы и, следовательно, могут быть индуцированы средой.

Значения частот оптического типа находятся в диапазоне 16-200 $см^{-1}$, который может быть подробно исследован с помощью рамановской спектроскопии.

ЛИТЕРАТУРА

1. Shih C.C., Georghiou S. Harmonic analysis of DNA dynamics in a viscous medium // J. Biomol. Struct. Dyn. V17. N 5. 2000. – P.921–932.

2. Nemtsov V.B., Kamluk A.N. Generalized dynamics of the conformational mobility in the DNA molecule // Nonlinear phenomena in complex systems. V.4, N.1. 2001. – P.58–63.

3. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. М.: Мир, 1987. –584 с.

4. Lisy V., Miskovsky P., Schreiber P. On a simple model of low-frequency vibrations in DNA macromolecules // J. Biomol. Struct. Dyn. V13. N 4. 1996. – P.707–716.

5. Волков С.Н., Косевич А.М., Вайнреб Г.Е. Теоретическое изучение низкочастотных колебаний макромолекул ДНК // Биополимеры и клетка. Т.5. N 6. 1989. – С.32–39.

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. V. 74. N. 5. 2001. – P.1253–1261.

УДК. 536.758+539.311

И.И. Наркевич, профессор; С.Я. Жукович, аспирант; Д.А. Павленко, студент

МОДИФИЦИРОВАННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ГАУССА ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛОВ СРЕДНИХ СИЛ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ КРИСТАЛЛОВ С ВАКАНСИЯМИ

Statistical theory of tension is developed here under a two – level molecular – statistical approach [1]. It is used to study the properties of crystals with vacancies viewed as a statistical system [2]. The micro– and macrostructure of the system of interacting molecules and the subsystem of vacancies in the theory of deformed crystals under study are described by microscopic correlative functions of conditional distribution by L.A. Rott [3] (microlevel) and fields of average numbers of filling with molecules of primitive crystal cells and various couples of these cells (macrolevel). For defining them we resort to the method of BBGKI [4] and the method of thermodynamic functionals of density [5].

Проведенные при разработке одномерной статистической модели растяжения – сжатия кристалла с вакансиями исследования показали [6], что возможно аналитическое изучение деформации в приближении Гаусса для потенциалов средних сил, которые определяют корреляционные функции распределения частиц и вакансий, т.е. описывают микро- и макроструктуру кристалла, а также внутреннюю энергию, энтропию и свободную энергию неоднородной конденсированной среды [1]. Учет структуры "сплошной среды" на всех уровнях описания является важным элементом нового подхода, который изложен в трехтомнике "Статистическая теория открытых систем" [2]. Потенциалы средних сил удовлетворяют бесконечной цепочке интегродифференциальных уравнений для корреляционных функций F_{11} метода условных распределений [3] с одночастичным заполнением молекулами элементарных ячеек объемом ω, число M которых больше числа частиц N ($N_b = M - N$ – число пустых ячеек, т.е. вакансий, концентрация которых $n_b = N_b / M$).

После обрыва цепочки уравнений и использования метода ББГКИ [4] совместно с методом термодинамических функционалов плотности [5] получено замкнутое интегральное нелинейное уравнение яяяяядля младших потенциалов средних сил φ_{lm} [1], которое для одномерной модели растяжения – сжатия имеет следующий вид [7,8] (Ф – потенциал Леннарда – Джонса):

$$e^{-\varphi(x)} = \frac{n_{lm}^{aa}}{n_a} \frac{\int_{\omega_m} e^{-\Phi(\tilde{r})} e^{-\varphi(x')} dx'}{\int_{\omega_m} e^{-\varphi(x')} dx'} + \frac{n_{lm}^{ab}}{n_a} \frac{\int_{\omega_l} e^{-\varphi(x)} e^{-\varphi(-x)} dx}{\int_{\omega_l} e^{-\varphi(-x)} dx}. \qquad (1)$$