

9. Argyrakis P., Groda Ya.G., Bokun G.S., Vikhrenko V.S. // Phys. Rev. E. 2001. Vol. 64. – P. 066108-1.
10. Vikhrenko V.S., Groda Ya.G., Bokun G.S. // Phys. Let. A. 2001. Vol. 286. – P. 127.
11. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1971. – 416 с.
12. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. – М.: Наука, 1979. – 280 с.
13. Бокун Г.С., Вихренко В.С., Убинг К. // Труды БГТУ. 1998. Вып. 6, сер. IV. – С. 28.
14. Грода Я.Г. // Труды БГТУ. 1999. Вып. 7, сер. IV. – С. 41.
15. Domb C. // Adv. Phys. 1960. Vol. 9. – P. 149.
16. Wysin G.M., Kaplan J. // Phys. Rev. E. 2000. Vol. 61. – P. 6399.
17. Kikuchi R. // Progr. Theor. Phys. Suppl. 1994. № 115 – P. 1.

УДК 536.758

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

ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ОРИЕНТАЦИОННУЮ УПРУГОСТЬ МОЛЕКУЛЫ ДНК

In the framework of the liquid crystalline model of DNA molecule the calculation of the orientational elasticity is carried out with accounting the Coulomb interaction between the structural elements of this molecule.

Объединение микроскопического описания жидкокристаллической модели ДНК с электростатической связано с чрезвычайно большими трудностями, определяемыми дальнедействующим характером кулоновского взаимодействия и большим числом степеней свободы структурных элементов. Для изотропной среды с проблемой дальнего действия удастся справиться, как это было, например, показано в работах [1,2], в не-изотропном же случае даже вид уравнений для кулоновской части неизвестен. Поэтому в данной работе предлагается некоторый упрощенный вариант описания такой системы, позволяющий хоть в какой-то степени учесть влияние электростатического взаимодействия на жидкокристаллические свойства молекулы ДНК, в частности на ориентационную упругость, характеризуемую соответствующими модулями. При этом используются идеи разработанной ранее статистической теории и расчетные формулы для упомянутых модулей [3,7]. Развитый в указанной работе подход ориентирован на чистые системы, поэтому заряженные объекты молекулы ДНК будем рассматривать как однокомпонентную систему на компенсирующем фоне, а растворитель будем учитывать лишь с помощью диэлектрической проницаемости ϵ_d . Тогда уравнение для одночастичного потенциала средних сил, определяющего унарную функцию распределения, будет иметь вид (см.[1])

$$\beta\varphi(1) = -\frac{\rho}{Q} \int d^2 \left\{ \exp \left[-\beta \left(\Phi^s(1,2) + \Phi^c(1,2) + \omega(1,2) \right) \right] - 1 \right\} \exp[-\beta\varphi(2)], \quad (1)$$

где Φ^s , Φ^c – короткодействующая и кулоновская составляющие межчастичного взаимодействия, ω – неприводимая часть двухчастичного потенциала средних сил, ρ – плотность, $\beta = 1/k_B T$,

$$Q = \int d1 \exp[-\beta\phi(1)]. \quad (2)$$

Как было показано ранее [1], короткодействующей является лишь комбинация $\Omega = \Phi^c + \omega$, которая в изотропном случае определяется некоторым нелинейным интегральным уравнением, в данном же случае по указанным выше причинам в качестве Ω используем только внеинтегральный член:

$$\Omega = \frac{(pe)^2}{\varepsilon d^r} \exp(-kr), \quad (3)$$

где r – расстояние между центрами масс структурных элементов, pe – их заряд, а k – дебаевский параметр.

Такая аппроксимация делает уравнение (1) замкнутым. В качестве короткодействующей части Φ^s использовался потенциал Гэя–Берне [4]:

$$\Phi^s = 4\varepsilon (s^{12} - s^6) \quad (4)$$

где

$$s = \frac{\sigma_0}{r - \sigma + \sigma_0}, \quad (5)$$

$$\sigma = \sigma_0 \left\{ 1 - \frac{\chi}{2} \left[\frac{(\mathbf{e} \cdot (\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2))^2}{1 + \chi \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2} + \frac{(\mathbf{e} \cdot (\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2))^2}{1 - \chi \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2} \right] \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (6)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \left\{ 1 - \frac{\chi'}{2} \left[\frac{(\mathbf{e} \cdot (\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2))^2}{1 + \chi' \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2} + \frac{(\mathbf{e} \cdot (\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2))^2}{1 - \chi' \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2} \right] \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (7)$$

$$\chi = \frac{d^2 - 1}{d^2 + 1}, \quad \chi' = \frac{\sqrt{k'} - 1}{\sqrt{k'} + 1}; \quad (8)$$

d, k' – отношения размеров продольной и поперечной осей эллипсоида вращения, моделирующего форму структурного элемента, и глубин потенциальных ям при ориентации элемента вдоль длинной и короткой осей соответственно; $\mathbf{e} = \mathbf{r}/r$, $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ – единичные векторы ориентации частиц (каждый из них задается двумя углами). Таким образом, каждый структурный элемент имеет пять степеней свободы, и поэтому интеграл в (1) имеет такую же кратность. Вычисление интегралов подобного рода представляет серьезную проблему, решаемую, как правило, с помощью метода Монте-Карло. Однако при решении нелинейных уравнений он не может использоваться из-за случайного расположения узлов. Выход может быть найден в использовании многомерных квадратурных формул с так называемыми псевдослучайными узлами [5].

Метод простых итераций для нахождения решения уравнения (1) при заметно отличающихся от нуля плотностях к успеху не приводит, поскольку интегральный оператор при этом не является сжимающим. Поэтому необходимо использовать более сложно организованные итерационные процедуры, среди которых операторный метод Нью-

тона считается наиболее перспективным. Применение данного метода к уравнению (1) означает следующее. Введем для сокращения записи обозначение

$$U(1,2) = \exp\left\{-\beta\left[\Phi^s(1,2) + \Omega(1,2)\right]\right\} - 1 \quad (9)$$

и запишем (1) в виде

$$\beta\left[\varphi^0(1) + \Delta(1)\right] = -\frac{\rho}{Q(\varphi^0 + \Delta)} \int d^2U(1,2) \exp\left\{-\beta\left[\varphi^0(2) + \Delta(2)\right]\right\} \quad (10)$$

где Δ – малая добавка к начальному приближению φ^0 , и разложим правую часть по Δ с сохранением только линейных членов. Будем иметь

$$\begin{aligned} \beta\left[\varphi^0(1) + \Delta(1)\right] &= -\frac{\rho \int d^2U(1,2) \exp\left[-\beta\varphi^0(2)\right] \left[1 - \beta\Delta(2)\right]}{\int d^3 \exp\left[-\beta\varphi^0(3)\right] \left[1 - \beta\Delta(3)\right]} = \\ &= -\frac{\rho}{Q(\varphi^0)} \left\{1 + \frac{\beta}{Q(\varphi^0)} \int d^3 \exp\left[-\beta\varphi^0(3)\right] \Delta(3)\right\} \times \\ &\times \int d^2U(1,2) \exp\left[-\beta\varphi^0(2)\right] \left[1 - \beta\Delta(2)\right] = \\ &= -\frac{\rho}{Q(\varphi^0)} \int d^2U(1,2) \exp\left[-\beta\varphi^0(2)\right] - \frac{\rho\beta}{Q^2(\varphi^0)} \int d^3 \exp\left[-\beta\varphi^0(3)\right] \Delta(3) \times \\ &\times \int d^2U(1,2) \exp\left[-\beta\varphi^0(2)\right] + \frac{\rho\beta}{Q(\varphi^0)} \int d^2U(1,2) \exp\left[-\beta\varphi^0(2)\right] \Delta(2). \end{aligned} \quad (11)$$

После перегруппировки членов получим линейное неоднородное интегральное уравнение для Δ :

$$\begin{aligned} \beta\Delta(1) &= -\left\{\beta\varphi^0(1) + \frac{\rho}{Q(\varphi^0)} \int d^2U(1,2) \exp\left[-\beta\varphi^0(2)\right]\right\} + \\ &+ \frac{\rho\beta}{Q(\varphi^0)} \int d^2U(1,2) \exp\left[-\beta\varphi^0(2)\right] \Delta(2) - \\ &- \frac{\rho\beta}{Q^2(\varphi^0)} \int d^2 \exp\left[-\beta\varphi^0(2)\right] \Delta(2) \int d^3U(1,3) \exp\left[-\beta\varphi^0(3)\right] \end{aligned} \quad (12)$$

$$Q(\varphi^0) = \int d^1 \exp\left[-\beta\varphi^0(1)\right]. \quad (13)$$

Следующее приближение определяется соотношением $\varphi^1 = \varphi^0 + \Delta$. Реализация описанного алгоритма позволяет найти одночастичную функцию распределения

$$f(\vartheta) = \frac{1}{Q} \exp\left[-\beta\varphi(\vartheta)\right] \quad (14)$$

с помощью которой можно определить все средние значения, фигурирующие в выражениях для модулей упругости молекулы ДНК [7]:

$$K_{11} = Ls^2 \left[\frac{1-\chi}{2\chi} (\langle \cos^2 \vartheta \rangle - \langle \cos^4 \vartheta \rangle) + \frac{3}{4} (\langle \cos^2 \vartheta \rangle - 2 \langle \cos^4 \vartheta \rangle + \langle \cos^6 \vartheta \rangle) - \right] (\langle \cos^2 \vartheta \rangle - \langle \cos^4 \vartheta \rangle), \quad (15)$$

$$K_{22} = Ls^2 \left[\frac{1-\chi}{\chi} (\langle \cos^2 \vartheta \rangle - \langle \cos^4 \vartheta \rangle) + \frac{1}{4} (\langle \cos^2 \vartheta \rangle - 2 \langle \cos^4 \vartheta \rangle + \langle \cos^6 \vartheta \rangle) \right] (\langle \cos^2 \vartheta \rangle - \langle \cos^4 \vartheta \rangle), \quad (16)$$

$$K_{33} = Ls^2 \left[\frac{1-\chi}{2\chi} (\langle \cos^2 \vartheta \rangle - \langle \cos^4 \vartheta \rangle) + \langle \cos^4 \vartheta \rangle - \langle \cos^6 \vartheta \rangle \right] \times (\langle \cos^2 \vartheta \rangle - \langle \cos^4 \vartheta \rangle), \quad (17)$$

$$L = 3(\pi R)^2 M (b\rho)^2 \sigma_0^5 \chi^3 \left(1 + \frac{3\chi^2}{14} \right) \beta (1-\chi)^2, \quad (18)$$

$$b = 4\pi\rho\sigma_0^3 m\chi^2 \left(1 + \frac{3\chi^2}{14} \right) / 3(1-\chi), \quad (19)$$

$$s = \langle P_2 \rangle, \quad (20)$$

$$m = - \int_0^{\infty} y^2 c(y) dy, \quad (21)$$

$$M = - \int_0^{\infty} y^4 c(y) dy, \quad (22)$$

где σ_0, χ – параметры потенциала Гэя–Берне, P_2 – полином Лежандра, R – радиус молекулы ДНК, ϑ – угол между длинной осью структурного элемента и некоторым фиксированным направлением, угловые скобки означают усреднение с помощью (14).

Входящая в (21), (22) величина c – прямая корреляционная функция для системы заряженных сферических частиц, определяемая уравнением Орнштейна–Цернике

$$h(r) = c(r) + \rho_j d^3 \int c(t) h(|\mathbf{r}-\mathbf{t}|) \quad (23)$$

при известной полной корреляционной функции

$$h = \exp(-\beta\zeta) - 1. \quad (24)$$

Если ввести среднее значение

$$K = \frac{1}{3} (K_{11} + K_{22} + K_{33}), \quad (25)$$

то можно определить безразмерные модули упругости

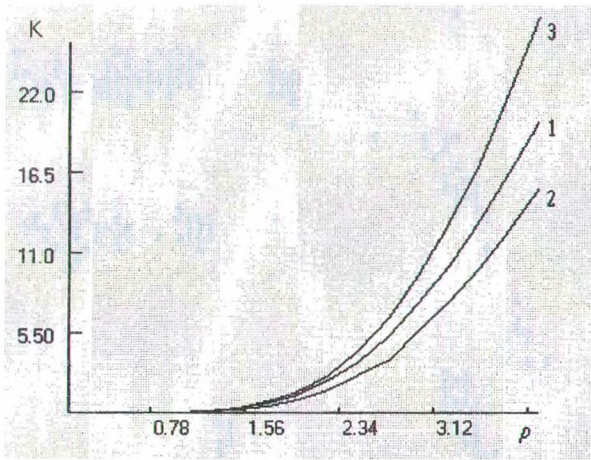
$$k_{11} = \frac{K_{11}}{K} = 1 + \frac{5\chi}{2(3-\chi)} - \frac{9\chi}{2(3-\chi)} z, \quad (26)$$

$$k_{22} = \frac{K_{22}}{K} = 1 - \frac{\chi}{2(3-\chi)} - \frac{3\chi}{2(3-\chi)} z, \quad (27)$$

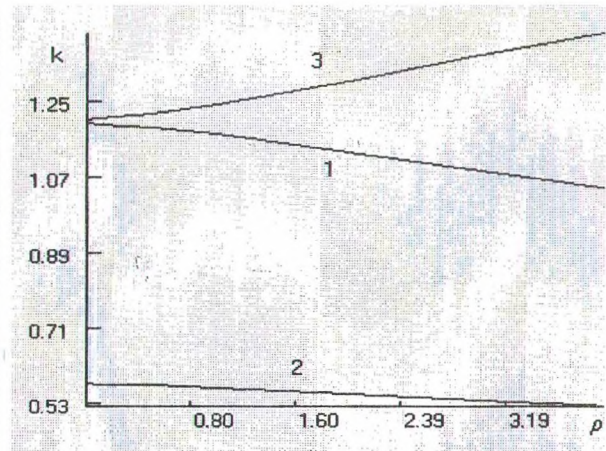
$$k_{33} = \frac{K_{33}}{K} = 1 - \frac{2\chi}{3-\chi} + \frac{6\chi}{3-\chi} z, \quad (28)$$

$$z = \frac{\langle \cos^4 \vartheta \rangle - \langle \cos^6 \vartheta \rangle}{\langle \cos^2 \vartheta \rangle - \langle \cos^4 \vartheta \rangle}. \quad (29)$$

На рисунках 1, 2 изображены рассчитанные по приведенным формулам зависимости модулей упругости от плотности при комнатной температуре. Их поведение напоминает таковое для системы нейтральных частиц [6], но в данном случае модули K изменяются с ростом плотности более сильно, а модули k – слабее (K – в единицах $\sigma_0 = 4 \text{ \AA}$, ρ – в молях на литр).



1 – K_{11} , 2 – K_{22} , 3 – K_{33}
Рис. 1



1 – K_{11} , 2 – K_{22} , 3 – K_{33}
Рис. 2

ЛИТЕРАТУРА

1. Белов В.В. Статистическое описание растворов сильных электролитов // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. Вып. VII. 1999. С. 51–58.
2. Белов В.В. Статистическое описание растворов сильных электролитов с многовалентными ионами // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. Вып. IX. 2001. С. 40–46.
3. Немцов В.Б. Неравновесная статистическая механика систем с ориентационным порядком. Мн.: Тэхналогія, 1997. 278 с.
4. Gay J.G., Berne V.J. Modification of the overlap potential to nematic a linear site-site potential // J. Chem. Phys. 1981. V. 74. P. 3316–3319.
5. Соболев И.М. Многомерные квадратурные формулы и функции Хаара. М.: Наука, 1969.
6. Белов В.В. Статистико-механическое описание свойств модельной системы с нецентральной взаимодействием: модули ориентационной упругости // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук. Вып. IV. 1996. С. 27–34.
7. Nemtsov V.B. Statistical Theory of the Elastic Properties of DNA Molecules // NonLinear Phenomena in Complex Systems. 1998. V. 1. No. 1. P. 109–113.