НЕЛИНЕЙНЫЕ УПРУГИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛЫ ДНК КАК ОДНОМЕРНОГО КРИСТАЛЛА

Немцов В.Б., Камлюк А.Н., Ширко А.В.

Белорусский государственный технологический университет,
220050, г. Минск, ул. Свердлова 13а, e-mail: nemtsov_vb@mail.ru

Молекула ДНК является одномерным нецентросимметричным кристаллом, обладающим спиральной (винтовой) структурой. Структурными элементами молекулы служат азотистые основания в среднем перпендикулярные оси двойной спирали, образованной сахаро-фосфатными полимерными цепочками. Последовательность азотистых оснований кодирует наследственную информацию. Структура молекулы ДНК определяет ее уникальные физические свойства. Так, отсутствие центра симметрии у молекулы ДНК (ее хиральность) приводит к тому, что деформирование молекулы ДНК вызывает изменение температуры и концентрации в среде, окружающей молекулу ДНК (механо-калорический и механо-химический эффекты [1]). В свою очередь, упомянутые изменения вызывают деформирование молекулы. Хиральность молекулы ДНК порождает зависимость между растяжением молекулы и ее закручиванием вокруг оси [2]. В теории упругих свойств молекулы ДНК результативна ее модель в виде одномерного хирального смектического жидкого кристалла, предложенная в работах [3, 4]. Согласно этой модели смектические слои, образованные азотистыми основаниями, поворачиваются вокруг оси двойной спирали по мере продвижения вдоль нее подобно среднему развороту молекул хиральных смектиков относительно их осей. В настоящей работе сделано обобщение методов, используемых в теории жидких кристаллов, для анализа деформации молекулы ДНК, ее упругости и динамических свойств с помощью жидкокристаллической модели.

Используя жидкокристаллическую модель молекулы ДНК, рассмотрим расчет ее упругих свойств при деформации изгиба и кручения на основе общей статистической теории упругих свойств жидких кристаллов.

Согласно рассматриваемой теории, тензор модулей ориентационной упругости Франка имеет вид

$$K_{ijmn} = \frac{1}{2}\int c(\mathbf{r},\omega,\omega')x_m x_n \frac{\partial\rho(\omega)}{\partial\theta_i}\frac{\partial\rho(\omega')}{\partial\theta_j} d\mathbf{r}d\omega d\omega', \tag{1}$$

где θ_i – малый средний угол поворота структурных элементов молекулы, x_m – компоненты радиус-вектора, $\beta = (k_B T^{-1})$, ω – набор угловых переменных, которые определяют ориентацию структурных элементов молекулы, $\rho(\omega)$ – одночастичная функция распределения, $c(\mathbf{r}, \omega, \omega')$ – прямая корреляционная функция.

В одномерном случае, когда ось идет вдоль оси молекулы (x_3=s), компоненты тензора моментных напряжений определяются как

$$\Pi_{13} = K_{1133}(\gamma_1 - \gamma_1^0), \quad \Pi_{23} = K_{2233}(\gamma_2 - \gamma_2^0), \quad \Pi_{33} = K_{3333}(\gamma_3 - \gamma_3^0), \tag{2}$$

причем компоненты псевдо вектора деформаций имеют вид

$$\gamma_1 = \frac{\partial\theta_1}{\partial s}, \quad \gamma_2 = \frac{\partial\theta_2}{\partial s}, \quad \gamma_3 = \frac{\partial\theta_3}{\partial s}. \tag{3}$$

Изгибающие и крутящий моменты определяются из простых соотношений

$$M_1 = \int \Pi_{13} dA, \quad M_2 = \int \Pi_{23} dA, \quad M_3 = \int \Pi_{33} dA,. \tag{4}$$

где A – площадь поперечного сечения молекулы ДНК. Эти моменты представлены формулами

$$M_1 = K_1(\gamma_1 - \gamma_1^0), \quad M_2 = K_2(\gamma_2 - \gamma_2^0), \quad M_3 = K_3(\gamma_3 - \gamma_3^0). \tag{5}$$

Тогда упругие константы молекулы ДНК приближенно можно записать в виде

$$K_1 = AK_{1133}, \quad K_2 = AK_{2233}, \quad K_3 = AK_{3333}. \tag{6}$$

Основываясь на (1) и (6) получаем оценку порядка величины для K_1, K_2 и K_3 ($A \approx \sigma_0^2$):

$$K_1, K_2, K_3 \approx 10^{-28}\, Дж \cdot м, \tag{7}$$

что согласуется с результатами, представленными в экспериментальной работе [5].

Динамические свойства молекулы ДНК рассмотрим в деформированном состоянии. Напряженное состояние в этом случае характеризуется двумя несимметричными тензорами обычных τ_{ik} и моментных π_{ik} напряжений. Соответствующие им тензоры деформации $\varepsilon_{ik} = \partial u_i / \partial x_k - \varphi_m e_{mki}$, $\gamma_{ik} = \partial \varphi_i / \partial x_k$ выражаются через кинематически независимые векторы малых смещения u_i и угла поворота φ_i пар оснований.

Связь между напряжениями и деформациями описывается с помощью модулей упругости

$$\tau_{ik} = \lambda \varepsilon_{mm} \delta_{ik} + 2\mu \varepsilon_{ik}^s + 2\delta \varepsilon_{ik}^a + \alpha \gamma_{mm} \delta_{ik} + 2\eta \gamma_{ik}^s + 2\theta \gamma_{ik}^a,$$

$$\pi_{ik} = \alpha \varepsilon_{mm} \delta_{ik} + 2\eta \varepsilon_{ik}^s + 2\theta \varepsilon_{ik}^a + \beta \gamma_{mm} \delta_{ik} + 2\nu \gamma_{ik}^s + 2\varsigma \gamma_{ik}^a. \tag{8}$$

Здесь λ и μ – константы Лямэ, остальные величины являются новыми модулями упругости, отсутствующие в случае пренебрежения вращательными степенями свободы. Индексы s и a означают симметричную и антисимметричную части тензоров деформации. Для центросимметричной системы модули упругости α, η, θ отсутствуют.
Законы сохранения имеют вид

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k}, \quad j \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \pi_{ik}}{\partial x_k} + e_{imn} \tau_{nm} \tag{9}$$

где ρ – массовая плотность, j – плотность момента инерции

На основании (8) совместно с (9) устанавливаем уравнения движения для переменных u_i и φ_i, являющихся функциями продольной координаты x_3, дифференцирование по которой обозначено штрихами.

$$\rho \ddot{u}_1 = (\mu + \delta) u_1'' + (\eta + \theta) \varphi_1'' - 2\delta \varphi_2', \qquad j\ddot{\varphi}_1 = (\eta + \theta) u_1'' + (\nu + \varsigma) \varphi_1'' - 4\theta \varphi_2' - 2\delta u_2' - 4\delta \varphi_1,$$

$$\rho \ddot{u}_2 = (\mu + \delta) u_2'' + (\eta + \theta) \varphi_2'' + 2\delta \varphi_1', \qquad j\ddot{\varphi}_2 = (\eta + \theta) u_2'' + (\nu + \varsigma) \varphi_2'' + 4\theta \varphi_1' + 2\delta u_1' - 4\delta \varphi_2,$$

$$\rho \ddot{u}_3 = (\lambda + 2\mu) u_3'' + (\alpha + 2\eta) \varphi_3'', \qquad j\ddot{\varphi}_3 = (\alpha + 2\eta) u_3'' + (\beta + 2\nu) \varphi_3''. \tag{10}$$

Третье уравнение в (10) определяет распространение продольной волны смещения, а шестое – продольной волны угла поворота. В отличие от центросимметричной системы эти продольные волны связаны друг с другом. Первое, второе, четвертое и пятое уравнения в (10) описывают связанные поперечные волны смещения и угла поворота.

Можно отметить, что в случае обращения в нуль дополнительных модулей упругости (когда не учитываются вращательные степени свободы) первое, второе и третье уравнения становится уравнениями для обычных сдвиговых и продольной волн.

Рассмотрим решение первого, второго, четвертого и пятого уравнений (14) в виде плоских волн $u_i = U_i \exp[i(\omega t - kx_3)]$, $\varphi_i = \psi_i \exp[i(\omega t - kx_3)]$ (здесь ω – циклическая частота, k – волновой вектор, U_i и ψ_i – амплитуды соответствующих переменных).

Вектора амплитуд малых поперечных смещений и поворотов перпендикулярны волновому вектору. Введем компоненты U_1, U_2, ψ_1 и ψ_2 векторов $\mathbf{U}$ и $\boldsymbol{\psi}$ в плоскости, нормальной волновому вектору $\mathbf{k}$.

В этом случае из (10) получаем дисперсионное соотношение

$$\{\Delta_1\Delta_2 - k^4(\eta+\theta)^2 - 4\delta^2 k^2 - 4k[\Delta_1\theta - \delta k^2(\eta+\theta)]\}$$

$$\times\{\Delta_1\Delta_2 - k^4(\eta+\theta)^2 - 4\delta^2 k^2 + 4k[\Delta_1\theta - \delta k^2(\eta+\theta)]\} = 0 \qquad (11)$$

где $\Delta_1 = k^2(\mu+\delta) - \rho\omega^2$, $\Delta_2 = k^2(\nu+\varsigma) + 4\delta - j\omega^2$.

Для циркулярных волн $U^{\pm} = U_1 \pm iU_2$, $\psi^{\pm} = \psi_1 \pm i\psi_2$ на основании (10) находим

$$\{\Delta_1\Delta_2 - k^4(\eta+\theta)^2 - 4\delta^2 k^2 \mp 4k[\Delta_1\theta - \delta k^2(\eta+\theta)]\}U^{\pm} = 0 \qquad (12)$$

и такое же уравнение для $\psi^{\pm}$.

Отсюда следует, что знаки в соотношении (12) соответствуют различным циркулярным волнам. Наличие двух знаков в этом дисперсионном уравнении имеет принципиальное значение и указывает на то, что в неценросимметричных молекулах, к которым относится молекула ДНК, поперечные волны смещения и угла поворота с правой и левой круговой поляризацией распространяются с различной фазовой скоростью. При наложении таких круговых волн образуется волна линейной поляризации. Плоскость поляризации этой волны поворачивается на длине z вдоль оси молекулы на угол, определяемый разностью волновых векторов круговых волн левой и правой поляризации

Молекула ДНК способна испытывать большие нелинейные упругие деформации при ее сверхрастяжении. В этом случае на кривой растяжения появляется плато. Уникальный феномен образования плато продолжает оставаться объектом пристального внимания как теоретиков, так и экспериментаторов [6, 7].

ЛИТЕРАТУРА

1. V.B. Nemtsov. NPCS **3**, *1*, 37 (2000).
2. А.Н. Камлюк, В.Б. Немцов. УФЖ **47**, *8*, 722 (2002).
3. V.B. Nemtsov. Abstr. European Conf. Liq. Cryst, 370 (1997).
4. В.Б. Немцов. Неравновесная статистическая механика систем с ориентационным порядком. Тэхналогія, Мн. (1997).
5. F. Tanaka, H. Takahashi. J. Chem.Phus **83**, 6017 (1985).
6. V.B. Nemtsov. NPCS **6**, *1*, 586 (2002).
7. В.Б. Немцов, А.В. Ширко, А.Н. Камлюк. Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. **11**, 45 (2003).