

МОДЕЛЬ ДЕНАТУРАЦИИ МОЛЕКУЛЫ ДНК

А.В.Ширко, А.Н.Камлюк, В.Б.Немцов

Учреждение образования «Белорусский государственный технологический университет», Минск,
ул. Свердлова 13а, 220006, Республика Беларусь, E-MAIL: kamluk@mail.ru

Денатурация ДНК заключается в разрыве Н-связей и стэкинг-взаимодействий, что приводит к расплетанию и разделению цепей (без разрыва ковалентных связей) под действием температуры или рН. К локальному раскрытию пар оснований может привести также механическое воздействие на молекулу ДНК со стороны других молекул (РНК, белки и др.). В связи с этим, математическое моделирование внутренней подвижности молекулы ДНК и использование построенных моделей для изучения механизмов функционирования биомолекулы – одно из наиболее интересных и перспективных направлений современной теоретической биофизики.

На базе нелинейной модели Пейрарда – Бишоп [1] нами, следуя методу Галеркина [2], рассчитаны амплитудно-частотные зависимости при вынужденных колебаниях нуклеотидов молекулы ДНК. Показано, что локальное раскрытие пар оснований в спиральных молекулах типа ДНК объясняется появлением больших амплитуд колебаний, которые могут быть инициированы взаимодействием ДНК с высоко- и низкомолекулярными соединениями природного и антропогенного происхождения, при определенных отношениях частоты собственных колебаний нуклеозидов ДНК с частотой вынуждающей силы (см. формулу (1)).

$$\frac{\omega}{\omega_0} = \left(2(1 - \cos kh) + 4\sqrt{2}aD(cA)^{-1} \left(I_1(2\sqrt{2}aA) - I_1(\sqrt{2}aA) \right) + bA^{-1} \right)^{1/2}, \quad (1)$$

В выражении (1) ω – частота, зависящая от амплитуды A , ω_0 – частота собственных колебаний, $I_1(x)$ – функция Бесселя для мнимого аргумента, D и a – параметры потенциала Морзе, b – приведенная амплитуда вынуждающей внешней силы, h – расстояние между соседними парами оснований в вдоль оси молекулы, k – волновой вектор.

THE MODEL FOR DNA DENATURATION

Shirko A.V., Kamluk A.N., Nemtsov V.B.

BSTU, Sverdlov 13A Str., Minsk, 220006, Belarus

The frequency dependence of amplitude of nonlinear transverse waves in DNA molecule is obtained by means of Galerkin method on bases of the nonlinear Peyrard –Bishop model that is describing the transversal oscillations of nucleotides.

Литература

1. Peyrard M., Bishop A.R. Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62. P. 2755-2757.
2. Карпман, В.И. Нелинейные волны в диспергирующих средах. – М.: Наука, 1973. 175 стр.