

РАЗНООБРАЗИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ВОЛНОВЫХ РЕШЕНИЙ В СИНУС-ГОРДОН МОДЕЛИ ДНК

Якушевич Л. В., Краснобаева Л. А., Шаповалов А. В.,
Квинтеро Н. Р.

(Россия, Пущино, Томск; Испания, Севилья)

В данной работе представлены все виды двухсолитонных решений нелинейного уравнения синус-Гордон, имитирующего вращательные колебания оснований ДНК. Для разных видов однородных полинуклеотидных цепочек рассчитаны энергия, масса, импульс и размер конформационных возмущений, соответствующих этим решениям. Для двухсолитонного решения в виде бризера посчитаны также частоты и периоды.

В работе рассматривается одна из наиболее интересных моделей ДНК. Она была предложена в работах Инглэндера [1], где было показано, что вращательные движения оснований в одно-родной ДНК могут быть описаны уравнением синус-Гордон

$$\phi_{tt} = C_0^2 \phi_{zz} - \omega_0^2 \sin \phi, \quad (1)$$

где $C_0^2 = (K'a^2 / I)$ – скорость звука, $\omega_0^2 = (V / I)$ – частота колебаний отдельного, изолированного основания, I – момент инерции основания; K' – константа, характеризующая жесткость сахаро-фосфатной цепочки; a – расстояние между ближайшими основаниями в ДНК, V – энергия, необходимая для того, чтобы разорвать водородные связи внутри пар.

В предыдущих работах [2, 3] рассматривались односолитонные решения уравнения (1): кинк и антикинк, и двухсолитонное решение в виде бризера.

В данной работе рассматриваются все виды двухсолитонных решений, которые обычно находятся стандартным мето-

дом — методом обратной задачи рассеяния [4, 5]. Число этих решений равно четырем, и мы показали, что в самом общем виде они могут быть представлены следующим образом:

$$\phi_{k-k}(z, t) = 4 \operatorname{arctg} \left\{ \gamma_1 \frac{\operatorname{sh} \left[\pm \frac{\omega_0}{C_0} \frac{(z - v_{k-k}t + z_{01})}{\sqrt{1-\gamma_1^2} \sqrt{1-(v_{k-k}^2 / C_0^2)}} \right]}{\operatorname{ch} \left[\frac{\gamma_1}{\sqrt{1-\gamma_1^2}} \frac{\omega_0(t - \Omega_1 z + t_{01})}{\sqrt{1-\Omega_1^2 C_0^2}} \right]} \right\}, \quad (2)$$

$$\phi_{k-ak}(z, t) = 4 \operatorname{arctg} \left\{ \frac{1}{\gamma_2} \frac{\operatorname{sh} \left[\pm \frac{\gamma_2}{\sqrt{1-\gamma_2^2}} \frac{\omega_0(t - \Omega_2 z + t_{02})}{\sqrt{1-\Omega_2^2 C_0^2}} \right]}{\operatorname{ch} \left[\frac{\omega_0}{C_0} \frac{(z - v_{k-ak}t + z_{02})}{\sqrt{1-\gamma_2^2} \sqrt{1-(v_{k-ak}^2 / C_0^2)}} \right]} \right\}, \quad (3)$$

$$\phi_{k-ak}(z, t) = -\phi_{k-k}(z, t), \quad (4)$$

$$\phi_{Br}(z, t) = 4 \operatorname{arctg} \left\{ \frac{1}{\gamma_3} \frac{\operatorname{sin} \left[\pm \frac{\gamma_3}{\sqrt{1-\gamma_3^2}} \omega_0 \frac{t - \Omega_3 z + t_{03}}{\sqrt{1-\Omega_3^2 C_0^2}} \right]}{\operatorname{ch} \left[\frac{\omega_0}{C_0} \frac{(z - v_{Br}t + z_{03})}{\sqrt{1-\gamma_3^2} \sqrt{1-v_{Br}^2 / C_0^2}} \right]} \right\}, \quad (5)$$

где v_{k-k} , v_{k-ak} и v_{Br} — скорости движения нелинейных волн типа кинк-кинк, кинк-антикинк и бризер, γ_i , Ω_i , z_{0i} и t_{0i} — произвольные константы ($i = 1, 2, 3$). Учет асимптотики решений (2) – (5) при $t = \pm\infty$ приводит к дополнительному требованию:

$$\gamma_1^2 = v_{k-k}^2, \quad \gamma_2^2 = v_{k-ak}^2 \quad \text{и} \quad \gamma_3^2 = v_{Br}^2.$$

Необходимость удовлетворять преобразованию Лоренца дает дополнительное условие: $\Omega_i = v_j / C_0^2$, ($i = 1,2,3$; $j = k-k, k-ak, Br$).

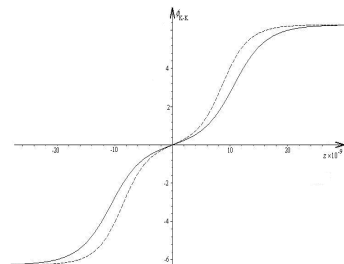


Рис. 1. Решение кинк-кинк

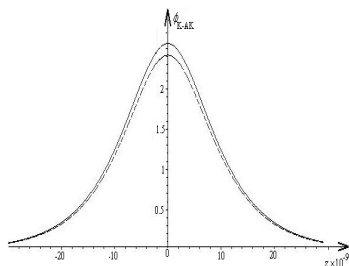


Рис. 2. Решение кинк-антикинк

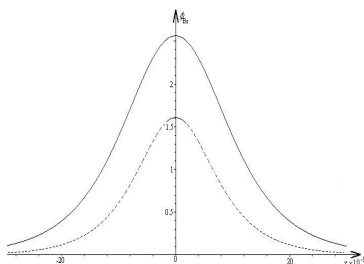


Рис. 3. Решение бризер

Отметим, что решение вида (4) неустойчивое [5], и в дальнейшем мы его рассматривать не будем. Графические изображения ос-

тальных решений, рассчитанных для различных полинуклеотидных цепочек, представлены на рисунках 1–3.

Расчеты выполнены при скоростях нелинейных волн, равных $v_j = 0.1 \times C_0$, и константах z_{0i} , t_{0i} , Ω_i , равных $z_{0i} = t_{0i} = \Omega_i = 0$, ($i = 1, 2, 3$; $j = k-k, k-ak, Bg$). Профили нелинейных волн в А- и Т-цепочках (сплошная линия) совпадают. Профили нелинейных волн в G- и С-цепочках (штриховая линия) также совпадают. При построении графиков мы учли, что уравнение синус-Гордон моделирует вращательную динамику оснований только в одной из двух полинуклеотидных цепочек, а вторая рассматривается только как внешнее поле, действующее на первую через водородные связи. Поэтому число модельных вариантов, для которых проводились расчеты, равно четырем. Для определенности мы назвали эти варианты следующим образом:

А–цепочка

AAAAAAAAAAAA . . .

||||||||||||

поле, наводимое Т–цепочкой,

Т–цепочка

TTTTTTTTTTTT . . .

||||||||||||

поле, наводимое А–цепочкой,

G–цепочка

GGGGGGGGGGG . . .

||||||||||||

поле, наводимое С–цепочкой,

и С–цепочка

CCCCCCCCCCC . . .

||||||||||||

поле, наводимое G–цепочкой.

В отличие от решений (2) – (4), решение (5) – бризер – имеет две дополнительные характеристики – частоту и период. По внешнему виду бризер напоминает «дышащий» колокол (см. рис. 3). Верхушка колокола движется вверх-вниз с частотой ω и периодом T , а сам колокол (его центр) перемещается вдоль цепочки ДНК с некоторой постоянной скоростью v_{Br} . Частота бризера определяется формулой

$$\omega = \omega_0 \gamma_{Br} \cos \mu. \quad (6)$$

Здесь $\omega_0 = (V/I)^{1/2}$, $\gamma_{Br} = (1 - (v_{Br}^2/C_0^2))^{-1/2}$; $\cos \mu = \gamma_3(1 - \gamma_3^2)^{-1/2}$. Заметим, что частота ω_0 совпадает с частотой колебаний отдельного, изолированного основания.

Период бризера равен

$$T_0 = \frac{2\pi}{\omega_0}. \quad (7)$$

Численные оценки частот и периодов, рассчитанные для различных видов полинуклеотидных цепочек, представлены в таблице 1.

Из формул (2), (3) и (5) определим размер (d) конформационных возмущений, отвечающих двухсолитонным решениям:

$$d = \left(\frac{K'a^2}{V} \right)^{1/2}. \quad (8)$$

Численные значения d , рассчитанные для А-, Т-, G- и С-цепочек, получены подстановкой в формулу (8) значений параметров ДНК [3]. Результаты представлены в таблице 2.

Из формул (2), (3) и (5) определим размер (d) конформационных возмущений, отвечающих двухсолитонным решениям:

$$d = \left(\frac{K'a^2}{V} \right)^{1/2}. \quad (8)$$

Численные значения d , рассчитанные для А-, Т-, G- и С-цепочек, получены подстановкой в формулу (8) значений параметров ДНК [3]. Результаты представлены в таблице 2.

Таблица 1. Значения частот и периода бризера (расчеты выполнены при $\mu = 0$)

Виды цепочки	Значения частот ω_0 (s^{-1})	Значения периода T_0 (s)
А-цепочка	5.24×10^{12}	1.19×10^{-12}
Т-цепочка	5.42×10^{12}	1.15×10^{-12}
G-цепочка	6.16×10^{12}	1.02×10^{-12}
С-цепочка	7.18×10^{12}	0.87×10^{-12}

Таблица 2. Численные значения величины d

Вид цепочки	Значение размера d (Å)
А-цепочка	35,5
Т-цепочка	35,5
G-цепочка	28,6
С-цепочка	28,6

Из таблицы 2 следует, что размеры нелинейных волн, движущихся в А- и Т-цепочках, равны. Аналогично равны и размеры нелинейных волн, движущихся в G- и С-цепочках. Заметим также, что в А- и Т-цепочках величина d больше, чем в G- и С-цепочках. Этот результат подтверждают и графики, представленные на рисунках (1) – (3).

Аналитические формулы для энергии покоя кинк-кинка, кинк-антикинка и бризера, рассчитанные нами для молекулы ДНК, имеют вид

$$E_{k-k,k-ak} = 16\gamma_{k-k,k-ak} \sqrt{K'V} = E_0\gamma_{k-k,k-ak}, \quad (9)$$

$$E_{0Br} = 16\gamma_{Br} \sin \mu \sqrt{K'V} = E_0\gamma_{Br}, \quad (10)$$

где $E_0 = 16\sqrt{K'V}$ — энергия покоя. Заметим, что энергии двухсолитонных решений в два раза превышают значения энергий односолитонных решений [4], следовательно, энергетически двухсолитонные решения мене выгодны.

Если в формулах (9) и (10) предположить, что скорость нелинейной волны удовлетворяет условию $v \ll C_0$, легко найти аналитические выражения для масс покоя:

$$m_{0k-k, k-ak} = \frac{16\sqrt{K'V}}{C_0^2}, \quad (11)$$

$$m_{0Br} = \frac{16 \sin \mu \sqrt{K'V}}{C_0^2}. \quad (12)$$

При $\mu = \pi/2$ формулы (9) и (10), (11) и (12) совпадают между собой. Подставляя в выражения (9) – (12) значения параметров ДНК [3], получим численные оценки для энергии и масс покоя, рассчитанные для различных вариантов однородных полинуклеотидных цепочек.

Таблица 3. Численные значения энергий и масс покоя (расчеты выполнены при $\mu = 0$)

Виды цепочки	Значения энергий покоя E_0 (kcal/mol)	Значения масс покоя m_0 (kg)
А-цепочка	500,92	975.56×10^{-27}
Т-цепочка	342,92	667.84×10^{-27}
Г-цепочка	602,94	1174.44×10^{-27}
С-цепочка	409,82	798.18×10^{-27}

Из таблицы 3 видно, что в Т- и С-цепочках солитон легче возбудить, чем в А- и Г-цепочках. Более того, учитывая, что сумма энергий активации солитонов в А- и Т-цепочках меньше, чем аналогичная сумма в Г- и С-цепочках, можно сделать вывод о том, что для возбуждения двухсолитонных конформационных волн в ДНК более предпочтительными будут участки последова-

тельности ДНК, насыщенные А-Т парами, и менее предпочтительны участки, насыщенные G-C парами, что хорошо коррелирует с экспериментальными данными.

Аналитические формулы для импульса кинк-кинка, кинк-антикинка и бризера, рассчитанные нами для молекулы ДНК, имеют вид

$$P_{k-k,k-ak} = 16v_{k-k,k-ak} \gamma_{k-k,k-ak} \sqrt{K'V}, \quad (13)$$

$$P_{Br} = 16v_{Br} \gamma_{Br} \sin \mu \sqrt{K'V}. \quad (14)$$

Заключение. Наши оценки показывают, что все найденные двухсолитонные решения энергетически менее выгодны, чем односолитонные решения. В то же время с точки зрения топологии двухсолитонные решения кинк-антикинк и бризер более предпочтительны, чем односолитонные, т.к. топологические заряды кинк-антикинка и бризера равны нулю ($Q = 0$). Что касается решения в виде кинк-кинка, то оно невыгодно и энергетически, и с точки зрения топологического заряда, который в этом случае равен двум ($Q = 2$).

Кроме того, выполненные нами оценки энергий двухсолитонных решений показывают, что для возбуждения двухсолитонных конформационных волн в ДНК более предпочтительными будут участки последовательности ДНК, насыщенные А-Т парами, и менее предпочтительны участки, насыщенные G-C парами, что хорошо коррелирует с экспериментальными данными.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта Президента РФ №. НШ-5103.2006.2

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Englander S.W., Kallenbach N.R., Heeger A.J., Krumhansl J.A. and Litwin A. Nature of the open state in long polynucleotide double helices: possibility of soliton excitations // Proc. Natl. Acad. Sci., 1980. — V. 77. — P. 7222–7226.

2. Якушевич Л.В., Краснобаева Л.А., Квинтеро Н.Р. L-A пара для ДНК // Математика. Компьютер. Образование : сб. научн. тр. / НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика». Москва – Ижевск, 2004. — С. 807 – 810.
3. Якушевич Л. В., Краснобаева Л.А., Шаповалов А.В., Кинтеро Н.Р. Одно-и двухсолитонные решения уравнения синус-Гордона в приложении к ДНК // Биофизика, 2005. — Т. 50. — № 3. — С. 450–455.
4. Захаров В.Е., Шабат А.Б. Точная теории двумерной самофокусировки и одномерной автомодуляции волн в нелинейных средах // ЖЭТФ, 1971. — Т. 61. — Вып. 1(7). — С. 118–134.
5. Раджараман Р. Солитоны и инстантоны в квантовой теории поля. — Москва: Мир, 1985. — 408 с.

VARIETY OF NONLINEAR WAVE SOLUTIONS IN SINE-GORDON MODEL OF DNA

Yakushevich L. V., Krasnobaeva L. A., Shapovalov A. V.,
Quintero N. R.

(RUSSIA, PUSHCHINO, TOMSK; SPAIN, SEVILLA)

In this work all kinds of two-soliton solutions of the nonlinear sine – Gordon equation, which imitates rotational vibrations of DNA bases are presented. Energy, mass, impulse and the size of the conformational distortions corresponding to these solutions, were calculated for different kinds homogeneous polynucleotide chains. Frequencies and periods were also calculated for two-soliton solutions having the form of breather.