

ДИНАМИКА ТОПОЛОГИЧЕСКИХ СОЛИТОНОВ В ДВОЙНОЙ СПИРАЛИ ДНК

Хамзин С.Р., Юлмухаметов К.Р., Закирьянов Ф.К.

Башкирский государственный университет,
Россия, 450074, г. Уфа, ул. З. Валиди, 32, +7(347) 273 67 23, farni@rambler.ru

В работе рассматривается дискретная модель двухцепочечной ДНК, основной вклад в динамику которой вносят вращения оснований вокруг сахаро-фосфатных цепочек. Гамильтониан для этой модели имеет следующий вид [1]:

$$H = \sum_n \left[\frac{1}{2} (I_1 \dot{\varphi}_{n,1}^2 + I_2 \dot{\varphi}_{n,2}^2) + \varepsilon_1 \sin^2 \frac{\varphi_{n+1,1} - \varphi_{n,1}}{2} + \varepsilon_2 \sin^2 \frac{\varphi_{n+1,2} - \varphi_{n,2}}{2} + V(\varphi_{n,1}, \varphi_{n,2}) \right],$$

где $V(\varphi_{n,1}, \varphi_{n,2}) = \kappa_1(1 - \cos\varphi_{n,1}) + \kappa_1(1 - \cos\varphi_{n,2}) + \kappa_2(1 - \cos(\varphi_{n,1} - \varphi_{n,2}))$.

Здесь $\varphi_{n,1}$ и $\varphi_{n,2}$ – углы поворота азотистых оснований в n -х узлах первой и второй цепочки соответственно, I_1 и I_2 – моменты инерции оснований первой и второй цепочки соответственно, ε_1 и ε_2 – коэффициенты упругой связи, κ_1 и κ_2 – жесткость взаимодействия соседних оснований в одной и разных цепочках соответственно. Система уравнений решалась численно с использованием методики, изложенной в [1].

Кроме численного анализа дискретной модели нами был проведен и теоретический анализ возможности получения решений с использованием теории возмущений для солитонов. В континуальном приближении с учетом дисперсии длинноволновых колебаний динамика системы описывается системой двух нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных:

$$I_1 \frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial \tau^2} - \varepsilon_1 \left(\frac{a^4}{12} \frac{\partial^4 \varphi_1}{\partial y^4} - \frac{a^4}{2} \left(\frac{\partial \varphi_1}{\partial y} \right)^2 \frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial y^2} + a^2 \frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial y^2} \right) + \kappa_1 \sin \varphi_1 + \kappa_2 \sin(\varphi_1 - \varphi_2) = 0$$
$$I_2 \frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial \tau^2} - \varepsilon_2 \left(\frac{a^4}{12} \frac{\partial^4 \varphi_2}{\partial y^4} - \frac{a^4}{2} \left(\frac{\partial \varphi_2}{\partial y} \right)^2 \frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial y^2} + a^2 \frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial y^2} \right) + \kappa_1 \sin \varphi_2 - \kappa_2 \sin(\varphi_1 - \varphi_2) = 0$$

Показана возможность существования в изучаемой модели четырех типов топологических солитонов с топологическими зарядами $\mathbf{q}=(1,0)$, $(0,1)$, $(1,1)$, $(-1,1)$, в рассматриваемом диапазоне дозвуковых скоростей. Получены зависимости энергии и ширины топологических солитонов от параметров кооперативности и безразмерной скорости. Проведено сравнение результатов численного и аналитического решений. Результаты показывают, что решения, полученные аналитическим методом и численным экспериментом качественно схожи.

Литература

I. L.V. Yakushevich, A.V. Savin, L.I. Manevitch. Название // *Phys. Rev. E*, **66**, 2002, 016614.