объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-84-359

В.К.Федянин, Л.В.Якушевич*

РАССЕЯНИЕ МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ И СВЕТА НА СОЛИТОНАХ ДНК

Направлено в журнал "Studia Biophysica"

* Институт биофизики АН СССР, Москва

1984

ВВЕДЕНИЕ

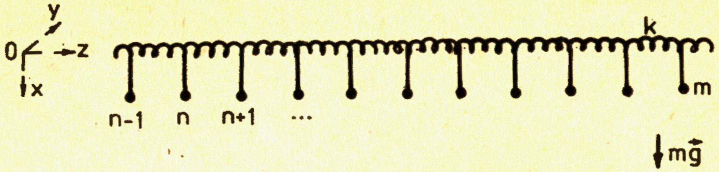
В работе Инглэндера и сотрудников [1] выдвинута новая интересная гипотеза о существовании "твистообразных" солитонных возбуждений /кинков/ в молекулах дезоксирибонуклеиновой кислоты /ДНК/. Подосновой этой гипотезы является простая "механическая" модель структуры ДНК, предложенная в [1] и позволяющая описывать процессы в ней нелинейным дифференциальным уравнением. Вопрос обоснования предположений, сделанных авторами, остается открытым, и отмечается лишь необходимость проведения решающих экспериментов, способных подтвердить или опровергнуть гипотезу.

Мы обсудим обоснованность этих предположений в другой работе. Здесь же в рамках этой "механической" модели исследуем особенности поведения динамических и статических характеристик рассеяния нейтронов и света на ДНК. Заметим, что именно экспериментальные исследования по рассеянию медленных нейтронов на квазиодномерном магнетике $CsNiF_3$ [2-5] в основном подтвердили предсказанные теоретически [6] изменения в спектрах рассеяния, обусловленные наличием солитонов. Мы полагаем, что аналогичные исследования могут оказаться решающими и в случае ДНК.

Цель работы - рассчитать спектр рассеяния медленных нейтронов и света на солитонах ДНК, в том числе и с учетом спиральности структуры ДНК, и таким образом стимулировать экспериментальные исследования в этом направлении.

1. "МЕХАНИЧЕСКАЯ" МОДЕЛЬ ДНК

Гипотеза Инглэндера и др. основана на данных эксперимента по водородно-тритиевому обмену. Эти данные свидетельствуют о том, что в ДНК в результате тепловых флуктуаций могут возникать и мигрировать вдоль молекулы локальные деформации, причем каждая такая деформация охватывает область, содержащую порядка десяти оснований. Детальный характер изменений структуры внутри этих областей неизвестен. Однако данные по водородно-тритиевому обмену позволяют предположить, что в области локальной деформации могут иметь место значительные повороты оснований вокруг сахаро-фосфатного остова. В работе [1] и было предложено описывать подобные крутильные колебания оснований ДНК с помощью известного механического аналога [7]. Последний представляет собой ряд маятников, подвешенных на равных расстояниях ℓ на горизонтальной нити /рис.1/. Маятники связаны между собой пружин-



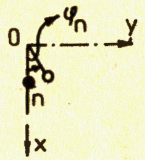


Рис.1. Механический аналог синус-Гордоновых систем.

ками и находятся под действием гравитационного поля. В случае ДНК аналогами маятников выступают азотистые основания одной из двух полинуклеотидных цепей, аналогами пружинок - сахаро-фосфатный остов, сопротивляющийся крутильным движениям оснований, аналогом внешнего поля - водородные связи между основаниями внутри пар.

Крутильные колебания механической модели /7/ описываются уравнениями вида

$$J\ddot{\phi}_n = K(\phi_{n+1} - 2\phi_n + \phi_{n-1}) - mgR\sin\phi_n;\ n = 1,2,\ldots,N, \qquad /1/$$

где ϕ_n - угловое отклонение n-го маятника от положения равновесия; J, m - момент инерции и масса отдельного маятника, R - длина подвеса, K - жесткость пружинок, g - гравитационная постоянная.

Перепишем уравнение /1/ на языке соответствующих параметров ДНК

$$I\ddot{\phi}_n = K_0(\phi_{n+1} - 2\phi_n + \phi_{n-1}) - v_0\sin\phi_n;\ n = 1,2,..,N. \qquad /2/$$

Здесь ϕ_n - угловое отклонение n-го основания от положения равновесия, I - момент инерции отдельного основания; K_0 - крутильная жесткость участков полинуклеотидной цепи между двумя соседними основаниями, функция $v_0\sin\phi$ моделирует силу, действующую между двумя основаниями внутри пары $(v_0 = const)$.

Перейдем к длинноволновому пределу $(z_n \to z;\ \phi_n(t) \to \phi(z,t))$

$$I\phi_{tt} = K_0\ell^2\phi_{zz} - v_0\sin\phi, \qquad /3/$$

или

$$\phi_{tt} - c_0^2\phi_{zz} + \omega_0^2\sin\phi = 0, \qquad /4/$$

где $c_0^2 = K_0\ell^2/I$, $\omega_0^2 = v_0/I$. Такой переход оправдан, если интересующие нас решения достаточно медленно и плавно изменяются вдоль цепи ДНК. В частности, для этого достаточно потребовать выполнения условия $2d = 2\ell\sqrt{\frac{K_0}{v_0}} \gg \ell$/см. /8/ /, где d - параметр, характеризующий размеры солитона. Ниже будет показано, что это условие прекрасно выполняется для ДНК.

Нелинейное дифференциальное уравнение /4/ представляет собой известное уравнение sine-Gordon. Оно имеет частные решения трех типов: фононы, солитоны /кинки/ и бионы /брифферы/ /8,9/. Другими словами, в рамках данной модели в ДНК возможны элементарные возбуждения трех типов: фононы, солитоны и бионы.

Системы, описываемые уравнением /4/, являются полностью интегрируемыми системами /10/. Соответствующий уравнению /4/ модельный гамильтониан имеет вид

$$H = A\int dz\,\{\frac{1}{2}\phi_t^2 + \frac{c_0^2}{2}\phi_z^2 + \omega_0^2(1 - \cos\phi)\}, \qquad /5/$$

где $A = I/\ell$. Можно подобрать такое преобразование к новым канонически-сопряженным переменным, в результате которого модельный гамильтониан /5/ разобъется на сумму вкладов от трех различных типов возбуждений: фононов, солитонов и бионов /8/. Это обстоятельство позволяет воспользоваться феноменологическим подходом /11,12/ к решению задачи о рассеянии, которая в общем случае может быть сведена теперь к задаче рассеяния на газе невзаимодействующих квазичастиц трех сортов: фононов, солитонов и бионов.

В данной заметке мы ограничимся рассмотрением частного случая рассеяния на солитонах ДНК. Решения уравнения /4/, отвечающие солитонам, определяются выражением /9/

$$\phi(z,t) = 4\tan^{-1}\{\exp\frac{\gamma\xi}{d}\}, \qquad /6/$$

где $\xi = z - z_0 - vt$, v - скорость солитона, $2d$ - размер солитона, $\gamma = (1 - \frac{v^2}{c_0^2})^{-1/2}$. Как квазичастица солитон характеризуется энергией $E_s = E_0\gamma$ и релятивистским моментом $P_z = M_0\gamma$, где E_0 - и M_0 - энергия и масса покоя, определяемые выражениями

$$E_0 = 8A\omega_0c_0 = 8\sqrt{K_0v_0};\quad M_0 = \frac{E_0}{c_0^2} = \frac{8I}{\ell^2}\sqrt{\frac{v_0}{K_0}}. \qquad /7/$$

Приведем оценки основных параметров уравнения /3/: I, K_0, v_0; гамильтониана /5/: A, ω_0, c_0; а также оценки величин d, E_0, M_0, характеризующих свойства солитонов ДНК.

Величину параметра I оценим в первом приближении, используя формулу $I = \bar{m}\bar{R}^2$, где $\bar{m}$ - масса основания, $\bar{R}$ - радиус спирали ДНК. В случае, когда основанием является, например, аденин, а также полагая $\bar{R} = 10$Å, получим $I = 224 \times 10^{-38}$ г см^2.

Величину параметра K_0 оценивают различными способами: из данных по флуоресценции /13/, из расчетов в рамках классической теории упругих стержней /14/, из данных по исследованию свойств суперспиральных ДНК /15/. Результаты оценок дают некоторый разброс величин K_0 примерно от $0{,}2 \times 10^{-11}$ до 2×10^{-11} эрг. В данной работе мы воспользуемся значением $K_0 = 0{,}32 \times 10^{-11}$ эрг, которое, как полагают авторы работы /13/, является лучшим значением, получаемым из исследований суперспиральных ДНК.

Чтобы оценить величину параметра v_0, воспользуемся значением энергии активации $E_0 = 6$ ккал/моль, приводимом в /1/. Это значение получено авторами из экспериментальных данных по измерению температурной зависимости водородно-тритиевого обмена. Используя соотношение $E_0 = 8\sqrt{K_0 v_0}$, находим $v_0 = 0{,}85 \times 10^{-15}$ эрг.

Полагая $\ell = 3{,}4$Å, легко находим параметры гамильтониана: $A \cong 66{,}0 \times 10^{-3}$ г·см; $c_0 \cong 405{,}7$ м/с; $\omega_0 \cong 2{,}0 \times 10^{10}$ с$^{-1}$; а также величины d и M_0 : $d \cong 2{,}06 \times 10^{-8}$ см; $M_0 \cong 2{,}5 \times 10^{-22}$ г.

Заметим, что условие $2d \gg \ell$, обеспечивающее справедливость перехода к непрерывному пределу /см. переход от /2/ к /3//, прекрасно выполняется. Действительно, $2d/\ell \cong 120 \gg 1$*.

Заметим также, что температуры, отвечающие условиям естественного существования ДНК, относятся к области низких температур, т.е. для них выполняется условие $T \ll E_0/k_Б$, где $k_Б$ - постоянная Больцмана. Действительно, $E_0/k_Б \cong 3 \times 10^3$ °К, что в десять раз превышает значения комнатных температур.

2. РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ И СВЕТА НА ДНК

Вычисление спектра рассеяния нейтронов и света на модельных системах, описываемых уравнением sine-Gordon, по существу сводится к расчету продольной и поперечной составляющих динамического формфактора $S(\vec{q}, \omega)$. Алгоритм такого расчета, основанный на специфической зависимости солитонных решений от ξ /см./6// предложен в /11/; в /12/ он был с успехом использован при расчете вклада бионов. В данной работе мы, однако, ограничимся обсуждением вклада в $S(\vec{q}, \omega)$ возбуждений, описываемых формулой /6/. Учитывая аналогию ДНК и механической системы /7/, мы могли бы просто переписать результаты этого расчета в параметрах ДНК. Тем не менее мы приведем здесь кратко основные узловые моменты расчета для того, чтобы иметь возможность обобщить и уточнить его в следующем разделе с целью учета спиральности структуры ДНК.

Для простоты расчета представим основания ДНК в виде точечных рассеивающих центров*. Тогда оператор взаимодействия нейтронов с системой N оснований можно записать в виде

$$V(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m_0} \sum_{n=1}^{N} a_n \delta(\vec{r} - \vec{R}_n), \qquad /8/$$

где $\vec{R}_n$ - координата n-го рассеивающего центра; a_n - длина рассеяния на n-м центре; $\vec{r}$, m_0 - координата и масса нейтрона; $\hbar$ - постоянная Планка.

В равновесных положениях основания образуют регулярную одномерную решетку с периодом ℓ. Вследствие тепловых флуктуаций они могут совершать крутильные движения вокруг положений равновесия и в результате смещаются из равновесных положений $\vec{R}_n^{\circ} = \{R, 0, n\ell\}$ $(n = 1, 2, \ldots, N)$ в некоторые новые положения $\vec{R}_n = \{R\cos\phi_n; R\sin\phi_n; n\ell\}$. С учетом этого перепишем оператор /8/ в виде

$$V(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m_0} \sum_{n=1}^{N} a_n \delta(\vec{r} - \vec{R}_n^{\circ} - \vec{u}_n), \qquad /9/$$

где $\vec{u}_n$ - вектор смещения, определяемый выражением

$$\vec{u}_n = \{-R(1 - \cos\phi_n);\ R\sin\phi_n;\ 0\}. \qquad /10/$$

Тогда дважды дифференциальное сечение рассеяния, рассчитанное на единичный угол и на единичный интервал энергии рассеянного нейтрона, можно записать в виде /16/

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE'} = N\frac{k'}{k}\bar{a}^2 S^{\text{ког}}(\vec{q}, \omega) + N\frac{k'}{k}(\overline{a^2} - \bar{a}^2) S^{\text{неког}}(\vec{q}, \omega),$$

где

$$S^{\text{ког}}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar N} \sum_{n,n'} e^{-i\vec{q}(\vec{R}_n^{\circ} - \vec{R}_{n'}^{\circ})} \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega t} \langle e^{-i\vec{q}\vec{u}_n(t)};\ e^{i\vec{q}\vec{u}_{n'}(0)} \rangle, \qquad /11/$$

* Величина $2d/\ell \cong 120$ может быть соотнесена числу оснований, принимающих участие в образовании солитона. В действительности это число несколько меньше, поскольку, как отмечается в /1/, имеющиеся в литературе оценки жесткости ДНК завышены. Отметим, в этой связи, что для реальной оценки величины области ДНК, дающей вклад в "возбуждение солитонного типа", могут быть привлечены экспериментальные данные.

*Это предположение не является принципиальным. Неточечность оснований можно учесть стандартным способом, рассчитав соответствующий структурный формфактор /16/.

$$S^{\text{неког}}(\vec{q},\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar N}\sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega t} \langle e^{-i\vec{q}\vec{u}_n(t)}; e^{i\vec{q}\vec{u}_n(0)}\rangle ;$$

здесь $\hbar k$, $\hbar k'$ - импульсы нейтрона до и после рассеяния, $\hbar\omega = \left(\frac{\hbar k'^2}{2m_0} - \frac{\hbar k^2}{2m_0}\right)$ - изменение энергии нейтрона вследствие рассеяния, $\vec{q} \equiv \{q_x; q_y; q_z\} = \vec{k}' - \vec{k}$, $\overline{\ldots}$ - усреднение по ориентациям спинов и изотопам, $\langle\ldots\rangle$ - усреднение по положениям оснований.

Наибольший интерес представляет вычисление вклада неупругого когерентного рассеяния, который в первом /одночастичном/ приближении определяется выражением

$$S_{(1)}(\vec{q},\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar N} e^{-2w_{\vec{q}}} \sum_{n,n'} e^{-i\vec{q}(\vec{R}_n^o - \vec{R}_{n'}^o)} \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega t} \langle \vec{q}\vec{u}_n(t); \vec{q}\vec{u}_{n'}(0)\rangle \qquad /12/$$

где $w_{\vec{q}}$ - фактор Дебая-Валлера.

Подставляя компоненты векторов $\vec{R}_n^o$, $\vec{q}$ и $\vec{u}_n$ в формулу /12/, находим $S_{(1)}(\vec{q},\omega) = S_{\parallel}(\vec{q},\omega) + S_{\perp}(\vec{q},\omega)$, где продольная и поперечная составляющие динамического формфактора равны соответственно:

$$S_{\parallel}(\vec{q},\omega) = \frac{R^2 q_x^2}{2\pi\hbar N} e^{-2w_{\vec{q}}} \sum_{n,n'} e^{-iq_z\ell(n-n')} \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega t} \langle (1-\cos\phi_n(t)); (1-\cos\phi_{n'}(0))\rangle ;$$

$$/13/$$

$$S_{\perp}(\vec{q},\omega) = \frac{R^2 q_y^2}{2\pi\hbar N} e^{-2w_{\vec{q}}} \sum_{n,n'} e^{-iq_z\ell(n-n')} \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega t} \langle \sin\phi_n(t); \sin\phi_{n'}(0)\rangle .$$

В континуальном пределе $(z_n \to z;\ \phi_n(t) \to \phi(z,t))$ формулы /13/ преобразуются к виду

$$S_{\parallel}(\vec{q},\omega) = \frac{R^2 q_x^2}{2\pi\hbar N} e^{-2w_{\vec{q}}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{-iq_z(z-z')+i\omega t} \times$$

$$\times \langle (1-\cos\phi(z,t)); (1-\cos\phi(z',0))\rangle ;$$

$$/14/$$

$$S_{\perp}(\vec{q},\omega) = \frac{R^2 q_y^2}{2\pi\hbar N} e^{-2w_{\vec{q}}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{-iq_z(z-z')+i\omega t} \langle \sin\phi(z,t); \sin\phi(z',0)\rangle .$$

Оправданность перехода к континуальному пределу обсуждалась нами в предыдущем разделе. Вычисления в /14/ проводим в газовом приближении[/11/]. Усреднение по ансамблю солитонов $\langle\ldots\rangle$ аппроксимируем выражением $\bar{N}_s\langle\ldots\rangle_1$, где $\bar{N}_s$ - среднее число солитонов[/8/]

$$\bar{N}_s = N\frac{2\ell}{d}\sqrt{\frac{E_0}{2\pi\theta}}\, e^{-E_0/\theta}, \qquad (\theta = k_Б T), \qquad /15/$$

а скобки $\langle\ldots\rangle_1$ обозначают усреднение по состояниям отдельного /свободного/ солитона

$$\langle\ldots\rangle_1 = \frac{\int dz \int dp_z (\ldots) e^{-E_s/\theta}}{\int dz \int dp_z\, e^{-E_s/\theta}} = \{2M_0 c_0 K_1(\frac{E_0}{\theta})\}^{-1} \int dp_z (\ldots) e^{-E_s/\theta} ; \qquad /16/$$

здесь $K_1(\xi)$ - функция Макдональда.

Подставляя в /14/ солитонное решение /6/ и учитывая формулы /15/ и /16/, получим окончательно

$$S_{(1)}(\vec{q},\omega) = \frac{2R^2\ell d\gamma_0\sqrt{\frac{E_0}{2\pi\theta}}}{\hbar c_0 q_z K_1(\frac{E_0}{\theta})} e^{-2w_{\vec{q}}} e^{-E_0/\theta} \left\{ q_x^2 \left(\frac{\frac{\pi q_z d}{\gamma_0}}{\mathrm{sh}\frac{\pi q_z d}{2\gamma_0}} \right)^2 + q_y^2 \left(\frac{\frac{\pi q_z d}{\gamma_0}}{\mathrm{ch}\frac{\pi q_z d}{2\gamma_0}} \right)^2 \right\} e^{-E_0\gamma_0/\theta}, \qquad /17/$$

где $\gamma_0 = (1-\omega^2/q_z^2 c_0^2)^{-1/2}$.

В общем случае при анализе рассеяния света и нейтронов необходимо пользоваться релятивистской формулой /17/, но для области низких температур $(T \ll E_0/k_Б)$ и небольших скоростей $(\omega/q_z \ll c_0)$ получим более простой вариант формулы /17/:

$$S_{(1)}(\vec{q},\omega) \cong \frac{4R^2\ell dE_0}{\hbar c_0 q_z \pi\theta} e^{-2w_{\vec{q}}} \left\{ q_x^2 \left(\frac{\pi q_z d}{\mathrm{sh}\frac{\pi q_z d}{2}} \right)^2 + q_y^2 \left(\frac{\pi q_z d}{\mathrm{ch}\frac{\pi q_z d}{2}} \right)^2 \right\} e^{-E_0/\theta}\, e^{-M_0\omega^2/2q_z^2\theta} . \qquad /18/$$

Как видно из формул /17/ и /18/, рассеяние нейтронов на газе солитонов ДНК должно приводить к появлению центрального пика, ширина и интегральная интенсивность которого являются функциями температуры T и волнового вектора $\vec{q}$.

В заключение отметим, что полученные результаты /17/, /18/ могут быть использованы и для изучения рассеяния инфракрасного света на ДНК. Действительно, в этом случае спектральная плотность рассеянного света определяется выражением[/19,20/]

$$I(\vec{q},\omega) = I_0 \frac{a^2\omega^4}{2\pi c^4\rho^2} \sin^2\gamma \sum_{n,n'} e^{-i\vec{q}(\vec{R}_n^o - \vec{R}_{n'}^o)} \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega t} \langle e^{-i\vec{q}\vec{u}_n(t)}; e^{i\vec{q}\vec{u}_{n'}(0)}\rangle , \qquad /19/$$

где a - поляризуемость оснований, ω - разность между частотой волн падающего и рассеянного света, c - скорость света, ρ - расстояние между рассеивающей системой и точкой наблюдения, угол γ и интенсивность падающего света I_0 определяются соответственно формулами: $\cos\gamma = (\frac{\vec{\mathcal{E}}_0\vec{\rho}}{\mathcal{E}_0\rho})$; $I_0 = \frac{c}{2}\frac{|\vec{\mathcal{E}}_0|^2}{2\pi}$, где $\vec{\mathcal{E}}_0$ - вектор амплитуды волны падающего света; остальные обозначения имеют тот же смысл, что и обозначения формул /11/-/14/.

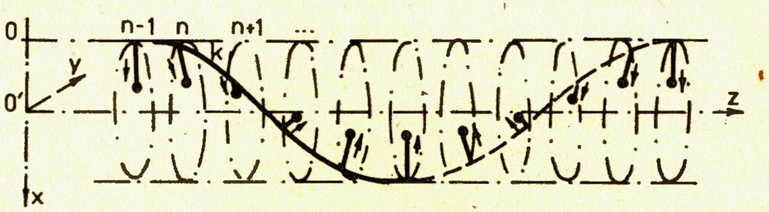
Сравнивая /19/ и /11/, находим

$$I(\vec{q},\omega) = I_0 \frac{\alpha^2\omega^4 hN}{c^4\rho^2} \sin^2\gamma\, S_{(1)}(\vec{q},\omega), \qquad /20/$$

где $S_{(1)}(\vec{q},\omega)$ определяется выражениями /17/ и /18/.

3. РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ И СВЕТА НА ДНК ПРИ УЧЕТЕ СПИРАЛЬНОСТИ ЕЕ СТРУКТУРЫ

Результаты вычислений спектра рассеяния /17/, /18/ получены в рамках предложенной Инглэндером механической модели ДНК. Эта модель эквивалентна системе связанных маятников во внешнем гравитационном поле /рис.1/. Характерными свойствами такой модели является вытянутость цепочки маятников вдоль оси z и постоянство /по величине и направлению/ внешнего гравитационного поля. Таким образом, рассматривается сугубо одномерный случай. В действительности полинуклеотидная цепь ДНК свернута в спираль, а внешнее поле, создаваемое второй цепью, изменяет направление от основания к основанию на угол $\phi_0 = 36°$. В этом разделе мы рассмотрим более реалистический вариант механической модели ДНК/рис.2/, учитывающий спиральность структуры ДНК.



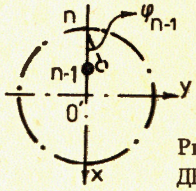


Рис.2. Улучшенная механическая модель ДНК.

С этой целью предположим, что цепочка маятников механической модели не вытянута вдоль оси z, а свернута в спираль, причем в равновесных положениях маятники располагаются таким образом, что точки подвеса лежат на спирали, а стержни направлены к оси спирали. В результате соседние маятники оказываются повернутыми друг относительно друга на угол $\phi_0 = 36°$. Предположим, что на-

правление внешнего поля также изменяется от маятника к маятнику на угол $\phi_0 = 36°$.

Легко видеть, что усложнение модели не изменяет внешнего вида уравнений движения /1/-/4/. В дискретном случае это очевидно. В длинноволновом пределе это утверждение справедливо при условии, что длины стержней R по величине близки к радиусу спирали. Таким образом, можно предположить, что в рамках новой модели также существуют солитонные решения /6/.

Посмотрим, как отразится изменение модели на результатах по рассеянию света и нейтронов. С этой целью выпишем координаты векторов $\vec{R}^{\circ}_n$, $\vec{R}_n$, $\vec{u}_n$.

$$\vec{R}^{\circ}_n = \{(R - 00')\cos\frac{2\pi n}{10};\ -(R - 00')\sin\frac{2\pi n}{10};\ n\ell;\},$$

$$\vec{R}_n = \{(R\cos\phi_n - 00')\cos\frac{2\pi n}{10} + R\sin\phi_n\cdot\sin\frac{2\pi n}{10};\ -$$

$$-(R\cos\phi_n - 00')\sin\frac{2\pi n}{10} + R\sin\phi_n\cos\frac{2\pi n}{10};\ n\ell\}, \qquad /21/$$

$$\vec{u}_n = \vec{R}_n - \vec{R}^{\circ}_n = \{R\cos\frac{2\pi n}{10}(\cos\phi_n - 1) + R\sin\frac{2\pi n}{10}\sin\phi_n;\ -$$

$$-R\sin\frac{2\pi n}{10}(\cos\phi_n - 1) + R\cos\frac{2\pi n}{10}\sin\phi_n;\ 0;\},$$

где $00'$ - радиус спирали. Подставляя компоненты векторов $\vec{R}^{\circ}_n$, $\vec{u}_n$ в /12/ и проводя последовательно вычисления, аналогичные тем, которые выполнены в предыдущей части, получим

$$S_{(1)}(\vec{q},\omega) = \frac{R^2\ell d\sqrt{\frac{E_0}{2\pi\theta}}}{hc_0 K_1(\frac{E_0}{\theta})} e^{-2w_{\vec{q}}} e^{-E_0/\theta} (q_x^2 + q_y^2)\{F_+(q_z + \frac{2\pi}{10\ell}) + F_-(q_z - \frac{2\pi}{10\ell})\};$$

где /22/

$$F_{\pm}(\xi) = \left\{\frac{\pi d\xi\sqrt{1-\frac{\omega^2}{c_0^2\xi^2}}}{sh(\frac{\pi d\xi}{2}\sqrt{1-\frac{\omega^2}{c_0^2\xi^2}})} \pm \frac{\pi d\xi\sqrt{1-\frac{\omega^2}{c_0^2\xi^2}}}{ch(\frac{\pi d\xi}{2}\sqrt{1-\frac{\omega^2}{c_0^2\xi^2}})}\right\}\frac{1}{\xi}\cdot(1-\frac{\omega^2}{c_0^2\xi^2})^{-1/2} e^{-\frac{E_0}{\theta}(1-\frac{\omega^2}{c_0^2\xi^2})^{-1/2}}.$$

Для области низких температур и небольших скоростей имеем

$$S_{(1)}(\vec{q},\omega) \cong \frac{R^2\ell dE_0}{hc_0\pi\theta} e^{-2w_{\vec{q}}} (q_x^2 + q_y^2)\{f_+(q_z + \frac{2\pi}{10\ell}) + f_-(q_z - \frac{2\pi}{10\ell})\}, \qquad /23/$$

где

$$f_{\pm}(\xi) = (\frac{\pi d\xi}{sh\frac{\pi d\xi}{2}} \pm \frac{\pi d\xi}{ch\frac{\pi d\xi}{2}})^2 \cdot \frac{1}{\xi} e^{-E_0/\theta} e^{-M_0\omega^2/2\theta\xi^2}.$$

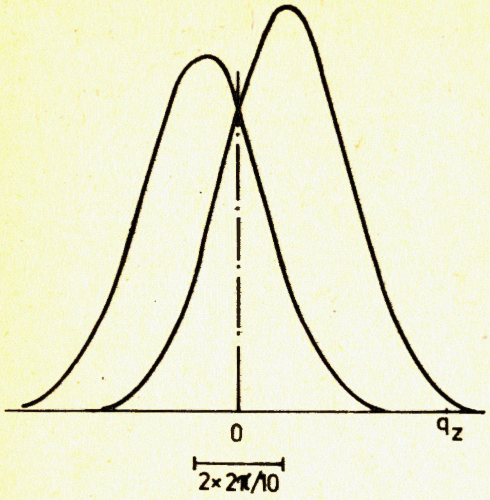


Рис.3. Схематическое изображение расщепления центрального пика на две компоненты /по переменной q / вследствие учета спиральности структуры молекулы ДНК.

Как видно из выражений /22/, /23/, учет спиральной структуры рассеивающей системы приводит к расщеплению /по переменной q / центрального пика спектра рассеяния на две компоненты, сдвинутые относительно друг друга на величину $4\pi/10\ell$ /рис.3/. Расщепление такого порядка ($2\pi/5\ell \simeq \mathring{A}^{-1}$) вполне может быть измерено при рассеянии тепловых нейтронов, получаемых на современных источниках нейтронов.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В настоящей работе мы рассчитали спектр рассеяния нейтронов и света на солитонах ДНК. Сначала расчет выполнялся в рамках простой механической модели, предложенной Инглэндером и сотрудниками, затем этот результат был уточнен учетом спиральности структуры рассеивающей системы. Полученные результаты /17/,/18/, /22/-/29/ предсказывают существование центрального пика в спектре рассеяния, причем параметры этого пика - интегральная интенсивность J и ширина линии $\Delta\omega$ - специфическим образом зависят от температуры T и волнового вектора $\vec{q}$. Для случая низких температур и малых скоростей солитонов эти зависимости имеют следующий вид

$$J = \int S_{(1)}(\vec{q},\omega)\,d\omega = \frac{A(\vec{q})}{\theta^{1/2}}\, e^{-E_0/\theta} \quad ; \quad \Delta\omega = B(\vec{q})\cdot\theta^{1/2}. \qquad /24/$$

Здесь коэффициенты $A(\vec{q})$ и $B(\vec{q})$ не зависят от температуры и определяются выражениями

$$A_I(\vec{q}) = \frac{4\sqrt{2}R^2\ell d}{h\sqrt{\pi E_0}}\, e^{-2w_{\vec{q}}} \left\{ q_x^2 \left(\frac{\pi q_z d}{\mathrm{sh}\frac{\pi q_z d}{2}} \right)^2 + q_y^2 \left(\frac{\pi q_z d}{\mathrm{ch}\frac{\pi q_z d}{2}} \right)^2 \right\};$$

$$A_{II}(\vec{q}) = \frac{\sqrt{2}R^2\ell d}{h\sqrt{\pi E_0}}\, e^{-2w_{\vec{q}}} (q_x^2+q_y^2) \left\{ \left[\frac{\pi d(q_z+\frac{2\pi}{10\ell})}{\mathrm{sh}\frac{\pi d}{2}(q_z+\frac{2\pi}{10\ell})} + \frac{\pi d(q_z+\frac{2\pi}{10\ell})}{\mathrm{ch}\frac{\pi d}{2}(q_z+\frac{2\pi}{10\ell})} \right] + \left[\frac{\pi d(q_z-\frac{2\pi}{10\ell})}{\mathrm{sh}\frac{\pi d}{2}(q_z-\frac{2\pi}{10\ell})} - \frac{\pi d(q_z-\frac{2\pi}{10\ell})}{\mathrm{ch}\frac{\pi d}{2}(q_z-\frac{2\pi}{10\ell})} \right]^2 \right\}; \quad B_I(\vec{q}) = \frac{q_z}{\sqrt{M_0}}; \quad B_{II}(\vec{q}) = \frac{q_z \pm \frac{2\pi}{10\ell}}{\sqrt{M_0}}. \qquad /25/$$

Индексы I, II в формулах /25/ указывают, что соответствующие коэффициенты вычислены в двух различных приближениях: в рамках модели Инглэндера /I/ и в рамках более точной модели /II/, учитывающей спиральность структуры ДНК.

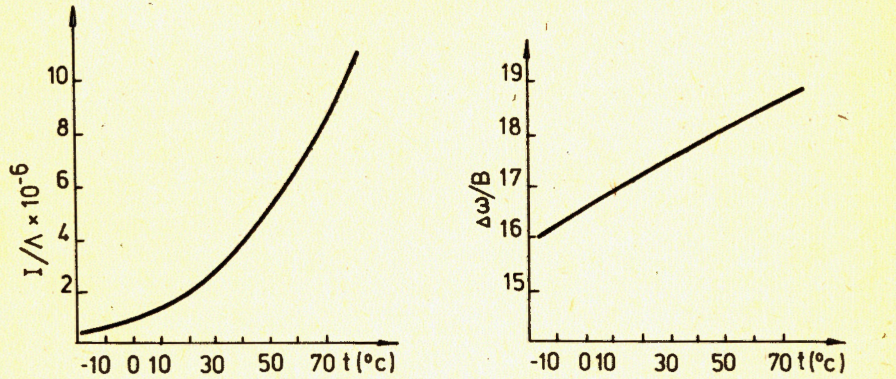


Рис.4. Графическое изображение температурной зависимости интегральной интенсивности J и ширины линии ($\Delta\omega$) центрального пика в спектре рассеяния нейтронов на солитонах ДНК.

Температурная зависимость параметров J и $\Delta\omega$ схематично представлена на рис.4. С увеличением температуры интегральная интенсивность центрального пика растет по экспоненциальному закону, а ширина линии возрастает пропорционально корню от T. Уточнение модели, связанное с учетом спиральности рассеивающей системы, не приводит к принципиальным изменениям в характере температурной зависимости, однако имеется существенное различие в характере q-зависимости как законов рассеяния /18/, /23/, так и соответствующих параметров J и $\Delta\omega$ /14/, /25/.

Следует сказать, что при вычислении спектра рассеяния ради простоты, а также для того, чтобы иметь возможность получить решение задачи в аналитическом виде, мы допустили ряд упрощений, которые в принципе могут быть сняты. В частности, можно снять ограничение точечностью рассеивающих центров /оснований/, учесть более сложный характер взаимодействий оснований внутри пар, возможность возбуждения других степеней свободы, влияние крутильных колебаний оснований второй полинуклеотидной цепи /т.е. влияние флуктуаций внешнего поля/ и т.д. В рамках механической модели можно учесть также вклад в центральный пик, даваемый рассеянием на бионах. Однако это уже другие задачи. Результаты данного расчета указывают на то, что, существуют ли солитоны в ДНК, можно выяснить из анализа экспериментов по рассеянию нейтронов или света. Причем характер ответа будет зависеть от того, будет ли обнаружен в спектре рассеяния центральный пик с вышеуказанной зависимостью от температуры и волнового вектора $\vec{q}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Englander S.W. et al. Proc.Nat.Acad.Sci.USA, 1980, 77, p.7222.
2. Kjems J.R., Steiner M. Phys.Rev.Lett., 1978, 41, p.1137.
3. Kjems J.R., Steiner M. Physica, 1983, 120B, p.250-254.
4. Boucher J.P. et al. J.Appl.Phys., 1981, 52, p.1956.
5. Boucher J.P. et al. Physica, 1983, 12B, p.241-249.
6. Mikeska H.J. J.Phys.C: Solid State Phys., 1978, 11, p.L-29; Physica, 1983, 120B, p.235-240.
7. Scott A.C. Am.J.Phys., 1969, 37, p.52.
8. Currie J.F. et al. Phys.Rev., 1980, B22, p.477.
9. Scott A.G., Chu F.Y.F., Melaughlin D.W. Proc.IEEE, 1973, 61, p.1443.
10. Fadeev L.D., Takhtadzhyan L.A. Theor.Math.Phys., 1974, 21, p.160.
11. Федянин В.К. ОИЯИ, Р17-82-268, Дубна, 1982; ОИЯИ, Р17-82-582, Дубна, 1982.
12. Маханьков В.Г. ОИЯИ, Р2-82-248, Дубна, 1982.
13. Barkley M.D., Zimm B.H. J.Chem.Phys., 1979, 70, p.2991.
14. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. "Наука", М., 1965.
15. Depew R.E., Wang J.C. Proc.Nat.Acad.Sci.USA, 1975, 72, p.4275.
16. Marshall W., Lovesey S.W. Theory of Thermal Neutron Scattering, Oxford, 1971.
17. Pecora R. J.Chem.Phys., 1965, 43, p.1562.
18. Комаров Л.И., Фишер И.З. ЖЭТФ, 1962, 43, с.1927.

Рукопись поступила в издательский отдел
24 мая 1984 года.

Федянин В.К., Якушевич Л.В. Р17-84-359

Рассеяние медленных нейтронов и света на солитонах ДНК

В работе получено аналитическое выражение для динамического структурного фактора рассеяния на солитонах /кинках/ нейтронов и света молекулой ДНК. Показано, что учет спиральности приводит к расщеплению центрального пика на два, расстояние между которыми $\sim \AA^{-1}$. В основу расчета положена возможность моделировать торсионные колебания оснований уравнением Sin-Gordon. Проанализирована зависимость интенсивности рассеяния от жесткости спирали "К", приведенного момента инерции оснований "I" и температуры Т.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Fedyanin V.K., Yakushevich L.V. P17-84-359

Scattering of Slow Neutrons and Light on DNA Solitons

An analytic expression is found for the dynamic structure factor of scattering on solitons (kinks) of neutrons and light by a DNA molecule. It is shown that helicity results in the splitting of a central peak into two peaks the distance between which is proportional to $\sim \AA^{-1}$. The calculation is based on the possibility to modulate torsional vibrations of bases by the Sin-Gordon equation. The dependence of the scattering intensity on the helix hardness K, reduced moment of inertia I, and temperature T is analysed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984