

**ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P17-87-200

В.Лисы, В.К.Федянин

**ДИНАМИЧЕСКИЕ СТРУКТУРНЫЕ
ФАКТОРЫ СОЛИТОНОВ
В КONTИНУАЛЬНОЙ МОДЕЛИ
ДВОЙНОЙ СПИРАЛИ ДНК**

Направлено в журнал "Studia biophysica"

1987

В работе /1/ был рассчитан спектр неупругого рассеяния медленных нейтронов и света на одном типе частицеподобных возбуждений молекулы ДНК. Водородная связь между парой комплементарных оснований описывалась потенциалом $V(\varphi) = V_0 (1 - \cos \varphi)$ (φ - угол крутильных колебаний основания относительно сахарофосфатного остова) (с жесткостью "К"), пренебрегалось различием моментов инерции оснований "I", но учитывалась спиральность структуры ДНК. ДНК локально рассматривалась как квазиодномерная система. Рассчитанный спектр квазиупругого рассеяния $S(q, \omega)$ обнаруживал характерное расщепление по q ($\Delta q \sim \lambda^{-1}$), интегральная интенсивность давалась формулой $S(q) = A(q) (kT)^{-1/2} \exp(-E_0/kT)$, ширина линии $\Delta\omega = B(q) (kT)^{1/2}$, E_0 , $A(q)$, $B(q)$ - приведены в /1/ и определяются параметрами ДНК: I, K_0, V_0, a_0 ($\sim 3,4 \text{ \AA}$). Для описания частицеподобных возбуждений в ДНК в /1/ были использованы кинковые решения SG уравнения, параметры которого ω_0, c_0 (см. ниже (1), (2)), определяются через V_0, I, K_0, a_0 . Можно надеяться, что привлечение картины частицеподобных возбуждений, описываемых решениями нелинейных дифференциальных уравнений, позволит рассмотреть крупномасштабные эффекты в ДНК: эффекты, обусловленные "вовлечением" в них большого числа пар комплементарных оснований. Характерные масштабы здесь $d = c_0/\omega_0 \gg a_0$. Упомянем в этой связи результаты /2/ по "открытым состояниям" ДНК.

Центральными моментами в такого рода подходах являются: а) моделирование потенциала водородной связи пары комплементарных оснований ($V(\varphi, \varphi')$), φ и φ' - углы крутильных колебаний комплементарных оснований относительно "своего" остова; б) учет диссипации в открытой системе "ДНК - внешняя среда"; эффектами диссипации, обусловленными колебаниями оснований "внутри" спирали, возможно, можно пренебречь. Естественно, существование долгоживущих частицеподобных возбуждений означает компенсацию диссипации подводом энергии извне. Решение вышеочерченной задачи с дальнейшим привлечением данных эксперимента и позволит либо подтвердить, хотя бы качественно, либо опровергнуть правомочность концепции долгоживущих частицеподобных возбуждений в ДНК.

Подробное обсуждение различных выборов потенциала $V(\varphi, \varphi')$ проведено в^{3,5/}. Там же получена система уравнений для $\varphi, \varphi', (\varphi + \varphi')/2, (\varphi - \varphi')/2$, — это естественные переменные в механической модели ДНК, — для весьма широкого класса $V(\varphi, \varphi')$. В случае, когда можно свести задачу к уравнению SG, можно считать, что частицеподобные возбуждения возникают только на одной из нитей двойной спирали, а сопряженный ей участок другой нити сохраняет равновесную конфигурацию оснований. Это в значительной мере оправдывает вычисления^{1/}, поскольку очевидно, что достаточно, как в^{1/}, рассматривать только одну из нитей: результат неупругого рассеяния на двух нитях будет удвоенным результатом рассеяния на одной нити.

В данной работе при расчете динамических структурных факторов (ДСФ) мы воспользуемся потенциалом работы^{4/}. Он несколько реалистичнее, нежели потенциал, использованный в^{1/}, и отражает многие черты гипотезы^{2/}. Помимо этого, расчеты^{1/} будут дополнены учетом вклада в ДСФ других односолитонных возбуждений SG модели: мы обсудим вклад в ДСФ кинков, антикинков и бионов (бризеров). Как будет видно, учет вклада антикинков существенно упростит результаты работы^{1/}, касающиеся центрального пика в спектре рассеяния, а учет вклада бризеров приведет к появлению в спектре совершенно новых качественных особенностей.

2. Рассмотрим SG уравнение для угла отклонения $\varphi(z, t)$ на одной из нитей (ось двойной спирали направлена по оси z системы координат)

$$\varphi_{tt} - c_0^2 \varphi_{zz} + \omega_0^2 \sin \varphi = 0 \quad (1)$$

Здесь, согласно^{4/},

$$c_0^2 = K_0 a_0^2 / I, \quad \omega_0^2 = (A + B) / I \quad (2)$$

Постоянные A и B являются параметрами потенциала взаимодействия в паре оснований (см. формулу (3) в^{5/}), K_0, a_0 и I определены в^{3/}. Уравнение (1) имеет решение в виде кинка ($\eta = I$) или антикинка ($\eta = -I$), которые даются формулой

$$\varphi = 4 \arctg \alpha, \quad \alpha = \exp[\eta \gamma (z - z_0 - vt) / d], \quad d = c_0 / \omega_0, \quad (3)$$

где z_0 — начальное положение солитона, v — его скорость, а $\gamma = (1 - v^2 / c_0^2)^{-1/2}$. Энергии и импульсы кинка и антикинка равны и определяются выражениями

$$E(v) = 8 I \omega_0 c_0 a_0^{-4} \gamma = 8 \gamma \sqrt{K_0(A+B)}, \quad p = E v c_0^{-2}$$

Сечение неупругого когерентного рассеяния медленных нейтронов основаниями определяется с помощью ДСФ^{6,1/}

$$S^{\text{coh}}(\vec{q}, \omega) = \frac{a_0}{2Lh} \sum_{nn'} e^{i\vec{q}(\vec{R}_n^0 - \vec{R}_{n'}^0)} \left\langle dt e^{-i\omega t} \langle (\vec{q} \vec{u}_n(t)) (\vec{q} \vec{u}_{n'}(0)) \rangle \right\rangle, \quad (4)$$

где $2L$ — длина спирали ($L \rightarrow \infty$), a_0 — расстояние между соседними основаниями вдоль спирали, \vec{R}_n^0 — равновесное положение n -го основания, \vec{u}_n — смещение основания с равновесного положения, h — постоянная Планка. Учитывая, что ввиду спиральности в В-форме ДНК соседние основания вдоль спирали в равновесии повернуты на угол $\alpha = \pi/5$ друг относительно друга, найдем для смещений \vec{u}_n в правой спирали

$$\vec{u}_n = R \left\{ (\cos \varphi_n - 1) \cos dn - \sin \varphi_n \sin dn, (\cos \varphi_n - 1) \sin dn + \sin \varphi_n \cos dn, 0 \right\}, \quad (5)$$

причем, $2R$ равно диаметру спирали (R — приведенная длина маятника, моделирующего основание). Перейдем в (4) от суммы к интегрированию и учтем, что $\vec{q}(\vec{R}_n^0 - \vec{R}_{n'}^0) = a_0 Q(n - n')$, $Q = q_z$. Для статистического усреднения используем приближение идеального газа солитонов^{7,8/}. В таком подходе $\langle \dots \rangle \approx \bar{N}_s \langle \dots \rangle_1$, где \bar{N}_s — среднее число солитонов в системе, а

$$\langle \dots \rangle_1 = \frac{1}{h j(\Gamma)} \int dz_0 dp e^{-\beta E} (\dots), \quad \beta = (kT)^{-1}, \quad (6)$$

p и E — введенные выше импульс и энергия солитона, $j(\Gamma)$ — статистический интеграл для отдельного солитона. В случае идеального газа $j = \bar{N}_s$ (если появление солитонов обусловлено только температурой, химический потенциал равен нулю). Объединяя сказанное выше, вместо (4) получим

$$S^{\text{coh}} \approx \frac{1}{2L a_0 h^2} \int dz dz' dt dp dz_0 e^{-\beta E - i\omega t + iQ(z - z')} [\vec{q} \vec{u}(z, t)] [\vec{q} \vec{u}(z', 0)]. \quad (7)$$

Подставляя (5) и (6) в (7), находим ДСФ рассеяния на кинках и антикинках. При этом нужно учесть различие в знаке $\sin \varphi$ для кинков и антикинков. Результат вычислений упрощается по сравнению с приведенным в^{1/}:

$$S^{\text{coh}}(\vec{q}, \omega) \approx \frac{2^5 \pi^3 d^3 R^2 I}{a_0^2 h^2} (q_x^2 + q_y^2) \left\{ f_+ + f_- \right\},$$

$$f_{\pm} = \frac{|Q_{\pm}|}{\gamma(v_{0\pm})} e^{-\beta E(v_{0\pm})} \left[ch^{-2} \left(\frac{\pi d Q_{\pm}}{2 \gamma(v_{0\pm})} \right) + (ch \rightarrow sh) \right], \quad (8)$$

$$Q_{\pm} = Q \pm \alpha / a_0, \quad v_{0\pm} = \omega / Q_{\pm}$$

По (8) нетрудно вычислить также статический структурный фактор $S(\vec{q}) = \int d\omega S^{\text{coh}}(\vec{q}, \omega)$ в нерелятивистском приближении $|v_{\text{оз}}| \ll c_0$. Его температурная зависимость имеет вид $S(\vec{q}) \sim \sqrt{T} \exp[-E(\omega)/kT]$. Необходимо подчеркнуть, что мы рассматриваем идеальный газ солитонов. Это приводит к плотности числа кинков и антикинков [7,8/

$$n_s^0 = \frac{2E_0}{hc_0} K_1(\beta E_0) \approx \frac{E_0}{hc_0} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta E_0}} e^{-\beta E_0}, \quad \beta E_0 \gg 1, \quad E_0 = E(0).$$

При рассмотрении взаимодействия солитонов с фононами предэкспоненциальный множитель в этой формуле изменяется: [7,8/

$$n_s \approx \frac{2}{d} \sqrt{\frac{\beta E_0}{2\pi}} e^{-\beta E_0}.$$

Замена n_s^0 на n_s в полученных формулах несколько изменяет температурную зависимость структурных факторов. В частности, для $S(\vec{q})$ будем иметь: $S(\vec{q}) \sim T^{-1/2} \exp[-8|\omega_0 c_0/kT a_0|]$. Заметим, что учет антикинков приводит к тому, что, в отличие от [1/], сечение рассеяния не зависит от того, левой или правой является спираль.

Рассмотрим более подробно центральный пик в рассеянии, определяемый формулами (8). Если бы мы не учитывали спиральность структуры ДНК, то S^{coh} описывалось бы (8), но с $Q_{\pm} \rightarrow Q$. Тогда в нерелятивистском приближении S^{coh} представлялось бы в виде

$$S^{\text{coh}} \sim f(Q) + \psi(Q),$$

$$f(Q) = Q \exp(-c^2/Q^2) \text{sh}^2(\pi Q d/2), \quad \psi(Q) = Q \exp(-c^2/Q^2) \times$$

$$\times \text{ch}^2(\pi Q d/2), \quad c^2 = E_0 \beta \omega^2 / 2c_0^2.$$

Функции $f(Q)$ и $\psi(Q)$ представляют собой пики с максимумами при $Q = Q_1$ и $Q = Q_2$, определяемыми из уравнений ($\omega > 0$)

$$1 + \frac{2c^2}{Q^2} - \frac{\pi Q d}{\text{th}(\pi Q d/2)} = 0, \quad 1 + \frac{2c^2}{Q^2} - \pi Q d \text{th}(\pi Q d/2) = 0,$$

причем $Q_1 \neq Q_2$. Если учитывается спиральность, то, согласно (8), каждая из линий $f(Q)$ и $\psi(Q)$ расщепляется на две линии, с максимумами в точках $Q_i \pm d/a_0$. Схематически эта картина изображена на рис. 1. Масштабы графиков сильно зависят от экспериментальных значений параметров (2), поэтому здесь они достаточно произвольны и рисунок носит только качественный характер. Величина расщепления (смещение пиков друг относительно друга) для ДНК равна $\approx 0,36 \text{ \AA}^{-1}$.

3. Как известно, СГ уравнение, кроме кинков и антикинков, обладает еще одной солитонной модой — бризерами. Вычисление ДСФ для бризеров значительно сложнее, чем для кинков, поскольку при усреднении

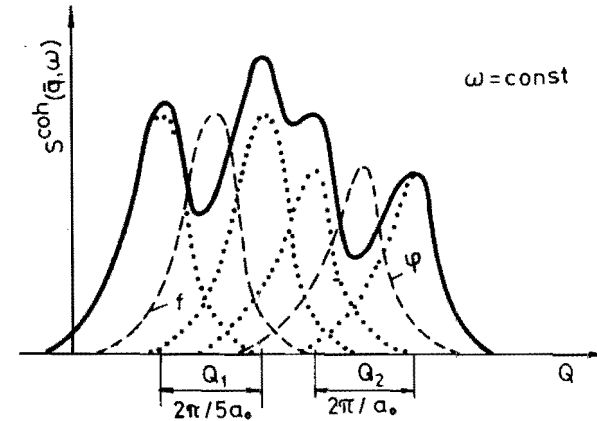


Рис. 1. Зависимость центрального пика в рассеянии на кинках и антикинках от $Q = q_z$. (— суммарная картина для S^{coh} с учетом спиральности, --- пики $f(Q)$ и $\psi(Q)$, составляющие S^{coh} без учета спиральности, ... влияние спиральности на рассеяние (расщепление)).

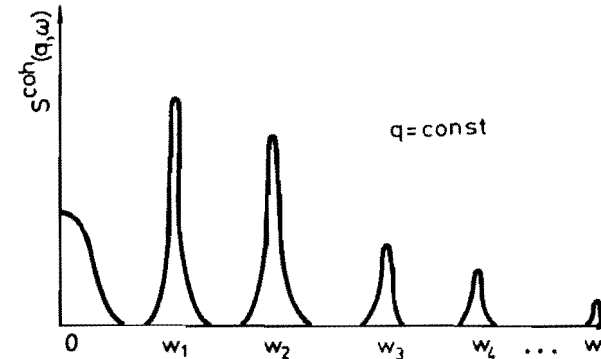


Рис. 2. Общая схематическая картина рассеяния на кинках, антикинках и бризерах ($w_1, w_2, w_3, \dots \equiv \omega_1^{\pm}, \omega_1^{\pm}, \omega_2^{\pm}, \dots$).

появляются новые переменные: внутренняя частота бризера и его начальная фаза. Все вычисления подробно изложены в ^{10/}. Учет спиральности (5) модифицирует эти результаты. Окончательное выражение для вклада в ДСФ бризеров имеет следующий вид:

$$S_b^{coh}(\vec{q}, \omega) \approx \frac{\pi^2 R^2}{a_0 h} (q_x^2 + q_y^2) \left[S_{||}(Q + \frac{d}{a_0}, \omega) + S_{\perp}(Q + \frac{d}{a_0}, \omega) + (\alpha - d) \right] \quad (10)$$

Здесь $S_{||}$ и S_{\perp} — так называемые "продольный" и "поперечный" ДСФ (терминология восходит к квазиодномерному магнетиту ^{7-10/}). Они обладают следующими свойствами ^{10/}: $S_{||}$ дает вклад в центральный пик (III), который складывается с вкладом кинков и антикинков. Кроме того, в $S_{||}(\vec{q}, \omega)$ возникает бесконечный ряд сателлитов. Вклад в III аппроксимируется формулой

$$S_{||sr}(\vec{q}, \omega) \approx \frac{2^{10} I d \delta^{11/4}}{\pi^{3/2} h |Q| \gamma^3(v_0) a_0 (2E_0 \beta)^{5/4}} \exp[-2(2E_0 \beta \delta)^{1/2}] \times (1 + \dots), \quad \delta = \pi Q d, \quad v_0^2 = (\omega/Q)^2, \quad (11)$$

с поправками, малыми при $\delta/2\beta E_0 \ll 1$ (но $2\sqrt{\beta E_0 \delta} \gg 1$). Сателлиты дают пренебрежимый вклад в III. Они расположены вблизи частот $\omega_N'' = [(Qc_0)^2 + (2N\omega_0)^2]^{1/2}$, $N = 1, 2, \dots$. При $\beta E_0 \gg 1$ это ярко выраженные пики с быстро уменьшающимися высотами с ростом номера сателлита N (заметим, что условие "низких" температур, $\beta E_0 \gg 1$, обсуждалось в ^{1/}, и для ДНК эти температуры высоки. При $\omega \rightarrow \omega_N''$ имеем $S_{||} = 0$. В ^{10/} подробно описаны свойства первого (самого интенсивного) сателлита, и получены для него приближенные аналитические формулы. Например, в области своего максимума сателлит описывается формулой

$$S_{||sat} \approx \frac{I}{h a_0} \left(\frac{2^6 d}{10} \right)^2 \Delta_{||}^3 e^{-\beta E_0 \omega \Delta_{||} / 4 \omega_0}, \quad \Delta_{||} = [(\omega_1'')^2 - \omega^2]^{1/2} / 2 \omega_0. \quad (12)$$

S_{\perp} не дает вклада в III, а образует ряд сателлитов, находящихся вблизи частот $\omega_N^{\perp} = [(Qc_0)^2 + (2N+1)^2 \omega_0^2]^{1/2}$, $N = 0, 1, \dots$. Высоты сателлитов также уменьшаются с ростом N . В ^{10/} подробно рассмотрен первый сателлит ($N = 0$). Его аппроксимация в области максимума следующая:

$$S_{\perp sat} \approx \frac{I}{h a_0} (2^3 d)^2 \Delta_{\perp} e^{-\beta E_0 \Delta_{\perp} \omega / 2 \omega_0}, \quad \Delta_{\perp} = [(\omega_1^{\perp})^2 - \omega^2]^{1/2} / \omega_0. \quad (13)$$

Таким образом, учёт бризеров существенно дополняет картину рассеяния нейтронов на солитонах в спиральной структуре ДНК (см. рис. 2).

Рассматривая зависимость S_b^{coh} от Q , видим, что по сравнению с рассеянием на квазиодномерной структуре ^{8, 10/} полученные линии из-за учёта спиральности расщепляются на пары с $Q + d/a_0$ и $Q - d/a_0$.

Наконец, как было подчеркнуто ещё в ^{1/}, полученные формулы для ДСФ можно использовать и для анализа рассеяния света. Спектральная плотность рассеянного света будет определяться формулой

$$I(\vec{q}, \omega) = I_0 \frac{\chi^2 \omega_i^4}{2\pi c^4 \rho^2} \sin^2 \theta \cdot \frac{2Lh}{a_0} S^{coh}(\vec{q}, \omega), \quad (14)$$

где χ — поляризуемость оснований, ω_i — частота падающего света, c — скорость света, $\vec{\rho}$ — вектор расстояния до точки наблюдения, I_0 — интенсивность падающего света, а θ — угол между $\vec{\rho}$ и вектором амплитуды волны падающего света.

ЛИТЕРАТУРА

1. Fedyanin V.K., Yakushevich L.V. "Studia biophysica", 1984, 103, p. 171.
2. Englander S.W. et al. Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 1980, 77, p. 7222.
3. Гочев И.В., Лиси В., Федянин В.К. ОИЯИ Р17-86-314, Дубна, 1986. "Studia biophysica", 1986, 116, p. 59.
4. Yoshida S. Phys. Rev., 1984, A30, p. 474.
5. Лиси В., Федянин В.К. ОИЯИ Р17-86-343, Дубна, 1986; "Studia biophysica", 1986, 116, p. 65.
6. Marshall W., Lovesey S.W. Theory of thermal neutron scattering, Oxford, 1971.
7. Currie J.F. et al. Phys. Rev., 1980, B22, p. 477; Krumhansl J., Schrieffer J. Phys. Rev. 1975, 11B, p. 3535.
8. Федянин В.К. ОИЯИ Р17-82-248, Дубна, 1982; Makhankov V.G., Fedyanin V.K., Phys. Rep., 1984, 104, p. 1.
9. Феддеев Л.Д., Тахтаджян Л.А. ТМФ, 1974, 21, с. 160.
10. Лиси В., Федянин В.К. ФНТ, 1985, II, с. 305. Лиси В., Маханьков В.Г., Федянин В.К. ОИЯИ Р17-85-410, Дубна, 1985.

Рукопись поступила в издательский отдел
31 марта 1987 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

D9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
D3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
D11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
D7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
D2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.
D13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.
D2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р. 30 к.
D1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р. 50 к.
D17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/	7 р. 75 к.
D10,11-84-810	Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983	3 р. 50 к.
	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984* /2 тома/	13 р. 50 к.
D4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра, Алушта, 1985.	3 р. 75 к.
D11-85-791	Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1985.	4 р.
D13-85-793	Труды XII Международного симпозиума по ядерной электронике. Дубна 1985.	4 р. 80 к.
D3,4,17-86-747	Труды У Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1986.	4 р. 50 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Лисы В., Федянин В.К.
Динамические структурные факторы солитонов в континуальной модели двойной спирали ДНК

P17-87-200

Рассчитаны динамические структурные факторы /ДСФ/ рассеяния нейтронов и света на солитонах в модели механических крутильных колебаний оснований ДНК. Взаимодействие в паре комплементарных оснований моделировалось потенциалом, предложенным Йомосой для объяснения быстрого протонного обмена в ДНК и приводящим к нелинейной модели синус-Гордона. Учитывалось рассеяние на кинках, антикинках и бризерах. Картина рассеяния, полученная ранее для кинков, существенно модифицируется, особенно благодаря вкладу бризеров. Кроме центрального пика ДСФ содержит бесконечный набор сателлитных линий.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод Г.Г.Сандуковской

Lisý V., Fedyanin V.K.
Dynamical Structure Factors of Solitons in a Continual Model of DNA Double Helices

P17-87-200

Dynamical structure factors (DSF) of the neutron and light scattering on solitons are calculated in the model of mechanical torsional vibrations of the bases in DNA. The interaction in the pair of complementary bases is modelled with the help of the potential suggested by Yomosa to explain the fast proton exchange in DNA. This potential leads to the nonlinear sine-Gordon (SG) model. The scattering on SG kinks, antikinks and breathers is taken into account. The scattering picture that was obtained earlier for kinks modifies significantly especially due to breathers. Besides the central peak, the DSF contains an infinite set of satellite lines.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987