ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/369

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ГЕЛИКОИДАЛЬНОЙ МОДЕЛИ МОЛЕКУЛЫ ДНК, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕЙ С ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДОЙ

¹Ковыляева А.Э., ²Никитюк А.С.¹Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия²Институт механики сплошных сред Уральского отделения РАН, Пермь, Россия

Основной задачей физики живых систем является изучение внутренней структуры и функций биомолекул. Дезоксирибонуклеиновая кислота (ДНК) относится к одной из наиболее важных молекул. Её основная функция – сохранение и передача генетической информации [3]. Влияние температуры, взаимодействие с белковыми молекулами, воздействия окружающей среды приводят к структурным изменениям в молекуле, а соответственно и к изменению функциональных свойств ДНК. Математическое моделирование динамики молекулы ДНК и использование данных моделей для изучения механизмов хранения и передачи структурных изменений на данный момент представляется перспективным направлением биомеханики.

Цель работы – исследовать аналитическим методом динамику молекулы ДНК, находящейся под действием окружающей среды. Для решения данной задачи используется геликоидальная модель ДНК. В модели каждая пара оснований имеет две степени свободы – радиальную и угловую [1]. Однако существенный недостаток геликоидальной модели – это отсутствие влияния среды на молекулу ДНК. Поэтому модифицируем данную модель путем добавления двух дополнительных слагаемых, отвечающих за диссипацию энергии и действие окружающих полей [2]. Диссипация энергии моделируемой молекулы ДНК описывается за счет внутреннего трения. Воздействия окружающей среды предлагается учитывать с помощью функции обобщенной внешней силы. Таким образом, Гамильтониан имеет вид:

$$H = e^{-\gamma t} \sum_n m \left(\left(\frac{p_{y_n}}{2m} \right)^2 + \frac{p_{\phi_n}^2}{4m^2 (y_n + R_0)^2} \right) + e^{\gamma t} \sum_n D \left(e^{-\alpha y_n} - 1 \right)^2 + \\ + e^{\gamma t} \sum_n K (L_n - L)^2 + e^{\gamma t} \sum_n G_0 (\phi_{n+1} + \phi_{n-1} - 2\phi_n)^2 - e^{\gamma t} F_n(t) y_n \quad (1)$$

где y_n и ϕ_n – смещение радиальной и угловой переменных от положения равновесия. [2].

В работе произведен обзор научной литературы, посвященной экспериментальному изучению молекулы, геликоидальной модели ДНК, а также методу многомасштабного разложения [1]. Разработана и реализована модифицированная геликоидальная модель ДНК. Найдено аналитическое решение уравнений движения нуклеотидов методом многомасштабного разложения (ММР). Основная идея метода заключается в поиске решения уравнений движения в виде волнового пакета на разных временных и пространственных масштабных уровнях. Получены пространственные зависимости смещений нуклеотидов в радиальном и угловом направлениях в начальный момент времени и с течением времени. Решением для радиальной переменной является локализованный бризер (рис. 1а), а для угловой – имеет кинк-структуру (рис. 1б).

Рис. 1. Аналитическое решение а) для радиальной переменной, б) для угловой переменной

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-41-590235).

Литература

1. Maria Barbi, Simona Cocco, Michel Peyrard, Stefano Ruffo Twist Opening Model for DNA // Journal of Biological Physics 24: 97– 1999.– P. 114.
2. Sulaiman A., Zen F.P., Alatas H., Handoko L.T. Dynamics of DNA breathing in the Peyrard–Bishop model with damping and external force // Physica D: Nonlinear Phenomena, 241, 19. – 2012. – Pp. 1640-1647.
3. Шредингер Э. Что такое жизнь? Физический аспект живой клетки. – Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная хаотическая динамика», 2002. – 92 с.