УДК 530.1:51-72 (575.2) (04)

ВОЗДЕЙСТВИЕ ГЕНЕТИЧЕСКОГО КОДА НА ПРОЦЕСС ФОРМИРОВАНИЯ ОТКРЫТЫХ СВЯЗЕЙ В МОЛЕКУЛЕ ДНК

В.М. Лелевкин – докт. физ.-мат. наук, профессор

М.А. Райымкулов – аспирант

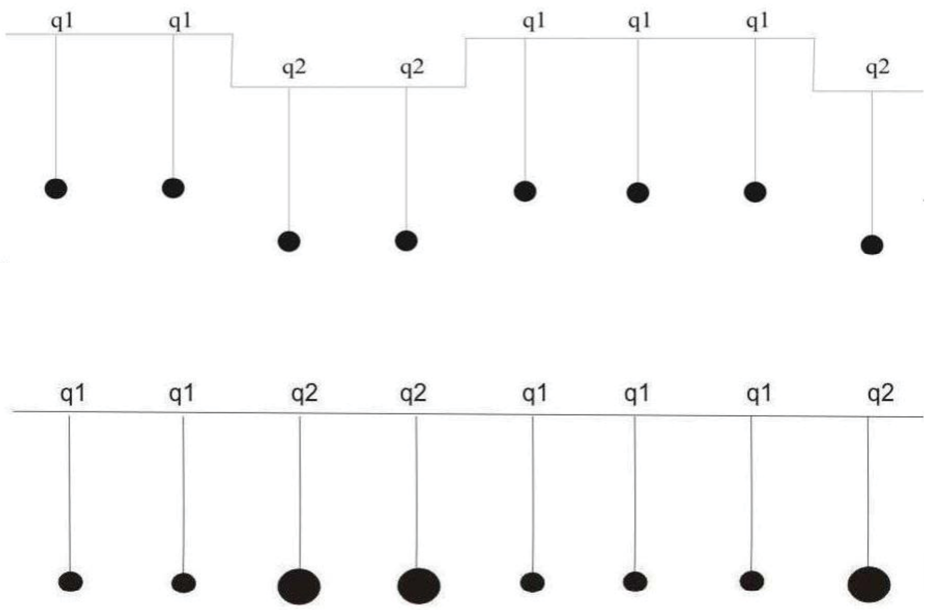
Рассматривается динамика кодированной молекулы ДНК. Динамику такой системы предлагается описывать фрактальным уравнением синус-Гордона. Во фрактальном пределе получено решение в виде кинка, параметры которого зависят от показателя фрактальности.

Ключевые слова: ДНК, фрактал, нелинейные возбуждения, генетический код, открытые связи.

Нелинейные возбуждения в молекуле ДНК более 30 лет являются объектами широкого исследования, что позволяет объяснить ряд явлений, наблюдаемых в ДНК: устойчивость спиральной структуры, структурные трансформации, генетическое регулирование. Эти свойства начинают привлекать внимание не только биологов, но и исследователей, работающих в области физики.

В пионерской работе [1], заложившей основу для дальнейшего развития проблемы в данной области, впервые было предложено описывать стабильные открытые состояния, формируемые в молекуле ДНК, при помощи солитонов. Открытые состояния, образуемые при разрыве водородных связей в парах основаниях, имеют биологическое значение. Например, при считывании информации (репликации) формируются локальные области открытых оснований, благодаря которым возникает возможность считывания информации, при этом в целом спираль ДНК сохраняет свою устойчивость [2]. Уточнение существующих физических моделей репликации, денатурации и т.д. является одной из главных задач физики в области исследования ДНК [3].

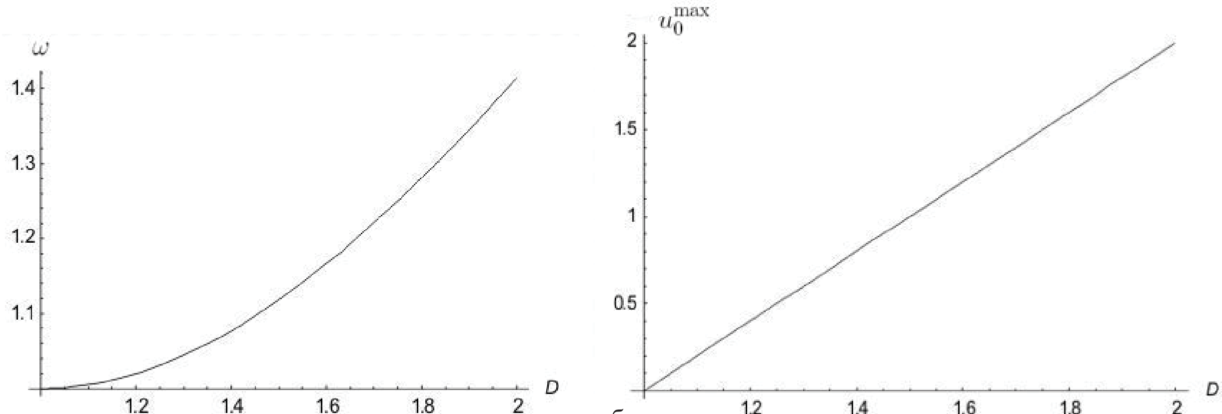
В данной работе предлагается рассматривать влияние генетического кода на формируемые открытые состояния, основываясь на фрактальных свойствах последовательности генетического кода [4]. Следует отметить, что решение данной задачи, впервые сформулированной в работе [2], сводится к нахождению таких свойств генетического кода, которые можно учесть при построении уравнения движения для ДНК.



а

б

Рис. 1. Квазиодномерная модель молекулы ДНК:
а – с фрактальной геометрической структурой; б – с фрактальным распределением массы.
Неоднородность q_i заменяется неоднородностью структуры ДНК.



а

б

Рис. 2. Зависимость частоты колебания (а) и амплитуды волны (б)
от показателя фрактальности.

Нелинейная модель ДНК с учетом генетического кода. Будем рассматривать неоднородную цепочку молекулы ДНК, определяемую последовательностью $\{q_i\}_{i=1}^{N}$, где q_i принимает значения q_{at} или q_{gc}. Из работы [1] рассматрим цепочку маятников (нуклеотидов), погруженных в потенциальное поле $m_i g_i l_i$. Тогда можно предложить два способа построения модели, в которых учитывается последовательность $\{q_i\}_{i=1}^{N}$ (рис. 1).

ДНК представляется в виде системы маятников, находящихся на разной высоте $l_j / l_i = q_j / q_i$.

ДНК представляется в виде системы маятников с различными массами грузиков $m_j / m_i = q_j / q_i$.

Фрактальность генетического кода характеризуется фрактальностью геометрии структуры, которая в конечном итоге переходит к модели с однородными значениями $q_i = q$, с фрактальной структурой.

Рассмотрим бесконечную цепочку маятников, тогда гамильтониан получаемой системы запишется в виде:

$$H = \int \left(\frac{1}{2} J p^2 + q(1 - \cos u) + \frac{1}{2} k u_x^2 \right) dx_D. \qquad (1)$$

Здесь вводится фрактальный интеграл, определяемый показателем фрактальности $1<D<2$. Связь элемента длины фрактального объекта с длиной линейной структуры определяется соотношением [5]:

$$dx_D = \frac{x^{D-1}}{\Gamma(D)} dx. \qquad (2)$$

Воспользуемся гамильтонианом (1), модифицированным уравнением Эйлера-Лагранжа. Тогда после некоторых преобразований получим модифицированное (фрактальное) уравнение синус-Гордона:

$$u_{tt} - u_{xx} - \frac{D-1}{x} u_x + \sin u = 0. \qquad (3)$$

Для линейной структуры, когда $D=1$, получим обычный вид уравнения синус-Гордона. Таким образом, получено уравнение движения для молекулы ДНК с учетом кодированной информации, определяемой показателем фрактальности D.

Кинковые возмущения на поверхности ДНК. Будем искать решение уравнения (3) в виде колебаний в локализованной области:

$$u(x,t) = u_0(x) \cos \omega t. \qquad (4)$$

Тогда уравнение движения (3) перепишется в виде:

$$u_{0xx} + \frac{D-1}{x} u_{0x} + \omega^2 u_0 - \theta = 0, \qquad (5)$$

где $\theta = \dfrac{\sin(u_0 \cos \omega t)}{\cos \omega t}$ является периодической функцией, среднее значение которой определяется как

$$\langle \theta \rangle_t = u_0 - \frac{1}{4} u_0^3. \qquad (6)$$

В соответствии с (5) и (6), получаем приближенное уравнение в виде:

$$u_{0xx} + \frac{D-1}{x} u_{0x} + (\omega^2 - 1) u_0 + \frac{1}{4} u_0^3 = 0, \qquad (7)$$

которое может быть приведено к уравнению Кана-Гилларда:

$$U_{\xi\xi} + \frac{1}{\xi} U_{\xi} + U - U^3 = 0, \qquad (8)$$

с граничными условиями $U(\pm\infty) = \pm 1$, где $u_0 = 2(D-1)U$, $\xi = (D-1)x$ и $\omega^2 \sim D-1$. Уравнение (8) имеет решение в виде кинкового локального возмущения:

$$U = th\left(\frac{\xi - R}{\sqrt{2}}\right) - \frac{1}{3\sqrt{2}R} th^2\left(\frac{\xi - R}{\sqrt{2}}\right) + O\left(\frac{1}{R^2}\right). \qquad (9)$$

Из указанных выше преобразований следует, что амплитуда и частота колебаний нуклеотидов зависит от показателя фрактальности, причем эта зависимость прямая (рис. 2).

Таким образом, построено аналитическое решение в виде локального нелинейного возбуждения, описывающее раскрытие связей с учетом генетического кода. Показано, что амплитуда и частота вращения нуклеотидов зависит от показателя фрактальности.

Литература

1. *Englander S.W. , Kallenbach N.R., Heeger A.J., Krumhansl J.A. and Litwin A.* Nature of open state in long polynucleotide double helices: possibility of soliton excitations // Proc. Natl. Acad. Sci. – 1980. – V. 77. – P. 7222–7226.
2. *Salerno M.* Discrete model for DNA-promoter dynamics // Phys. Rev. A. – 1991. – V. 44. – P. 5292–5297.
3. *Cuenda S. and Sanchez A.* Disorder and fluctuations in nonlinear excitations in DNA //Fluct. Noise Lett. – 2004. – V. 4. – L491–L504.
4. *Martinis M.* Nonlinear dynamics in the binary RNA/DNA coding problem // The 7th Int. Summer School on Biophysics, Rovinj, Sept. – 2000. P. 14–15.
5. *Tarasov V.E., Zaslavsky G.M.* Fractional Ginzburg-Landau equation for fractal media // Physica A. – 2005. – V. 354. – P. 249–261.