

ДИНАМИКА НЕЛИНЕЙНЫХ КОНФОРМАЦИОННЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ В ПЛАЗМИДЕ РТТQ18

Рясик А.А., Якушевич Л.В., Гриневич А.А.

ИБК РАН, Россия, 142290, Пущино, ул. Институтская д.3, (4967)739404,
arc7an@gmail.com

В настоящей работе рассматривается динамика нелинейных конформационных возмущений — кинков ДНК [1], которые играют важную роль в процессах белок-нуклеинового узнавания. Наибольший вклад в формирование этих возмущений вносят вращательные колебания азотистых оснований [2]. Одним из методов математического описания таких движений являются нелинейные динамические модели на основе уравнения синус-Гордона [1]. Однако модель синус-Гордона не позволяет полностью учесть различие расстояний R от центра масс азотистых оснований до сахарофосфатной цепочки. Для описания динамики кинков в общем случае мы модифицировали уравнение синус-Гордона таким образом, чтобы корректно учесть зависимость расстояния R от последовательности оснований. В континуальном приближении обезразмеренное уравнение имеет вид:

$$I(z) \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - K'(z) \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \lambda(z) \frac{\partial \phi}{\partial t} + V(z) \sin \phi - \frac{K'(z)}{R(z)} \left(2 \frac{\partial \phi}{\partial z} \frac{\partial R}{\partial z} + \phi \frac{\partial^2 R}{\partial z^2} \right) = 0. \quad (1)$$

Здесь $\phi(z, t)$ — угол отклонения основания от положения равновесия, t и z — время и координата. В случае, когда последовательность состоит из n произвольных однородных областей, разделенных границами, коэффициент уравнения I определяется формулой :

$$I(z) = \frac{I(z)}{I_1} = 1 + \frac{1}{I_1} \sum_{i=2}^n \frac{I_i - I_{i-1}}{1 + \exp((z_{b_{i-1}} - z)/\sigma)}, \quad (2)$$

где I_i — момент инерции азотистого основания в i -ой области. z_{b_i} — координата i -ой границы, σ — параметр определяющий наклон сигмоиды. Аналогично определяются остальные коэффициенты (K' , λ , V , R).

Уравнение (1) было решено численно с помощью метода конечно-разностных схем. С помощью полученной численной схемы были рассчитаны траектории кинков в плазмиде рТТQ18 [3] с кольцевой ДНК.

Литература.

1. Englander S. W. et al. (1980) Nature of the open state in long polynucleotide double helices: possibility of soliton excitations *Proceedings of the National Academy of Sciences* **77(12)**:7222-7226
2. L. V. Yakushevich (2004) *Nonlinear Physics of DNA*. Wiley-VCH
3. РТТQ18.GB, http://www.lifesci.dundee.ac.uk/groups/mike_stark/pTTQ18_DNA.txt