

DNA

...

(دریافت مقاله: ۱۳۸۸/۳/۱۸؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۸۸/۱۱/۶)

: Open state)

DNA

(

()

()

DNA

DNA

DNA

DNA

:

DNA، که مؤثر در تکثیر و همانند سازی است، گذار میان شکل‌های مختلف^۱ در مولکول DNA (برای مثال از حالت A به حالت B) می‌شود. برای آشنایی با مثال‌های بیشتر در این رابطه به مرجع [۳] مراجعه نمایید.

تا کنون روش‌های مختلفی برای مدلسازی حرکات درونی DNA معرفی شده و به کار رفته‌اند. یکی از این روش‌های جالب و موفق روشی است که نخستین بار توسط لویت برای دینامیک مولکولی [۴] و توسط انگلندر برای مولکول DNA [۵] در مقاله‌ای انقلابی با عنوان "طبیعت حالت‌های باز در مارپیچ دوتایی چند نوکلئوتیدی بلند: احتمال حضور پاسخ‌های تک سالیتمونی"

۱. مولکول DNA علیرغم داشتن شکل کلی یکسان، می‌تواند دارای حالات متفاوتی باشد. این تفاوت می‌تواند در فاصله میان پایه‌ها، زاویه بین آنها و نیز راستگرد یا چپگرد بودنشان باشد. این گونه تفاوت‌ها سبب ایجاد انواع A، B و Z و نظایر آن می‌گردد.

امروزه ساختار متحرک درونی برای مولکول DNA پدیده‌ای پذیرفته شده است. این حرکت درونی نقش مهمی را در کارکرد مولکول DNA بازی می‌کند [۱]. این حرکت درونی ممکن است ناشی از عواملی چون نوسان اتم‌ها از حالت تعادلشان، حرکات طولی و عرضی و چرخشی گروه‌های اتمی (گروه‌های فسفات- قند و زوج پایه‌ها)، برهم‌کنش مولکول DNA با پروتئین‌ها که در تکثیر DNA و در نتیجه تکثیر سلولی دخالت دارد، برهم‌کنش با داروها و یا برهم‌کنش با مولکول‌های محلول در محیط اطراف باشد. قرار گرفتن DNA در حمام دمایی نیز سبب حرکت DNA می‌شود [۲]. این حرکات‌های درونی سبب پدیده‌های مختلفی چون باز شدن رشته‌های

پیوند هیدروژنی پایه‌ها بود که صفر فرض شده بود. همچنین محاسبات عددی سالیتون‌ها برای مدل ترکیبی DNA توسط لئو و همکاران [۱۱] صورت گرفت.

در این مطالعه ما با در نظر گرفتن جمله اصلاحی برای پتانسیل برهم‌کنش در مدل استاندارد یاکوشویچ به بررسی جواب‌های سالیتون مانند خواهیم پرداخت.

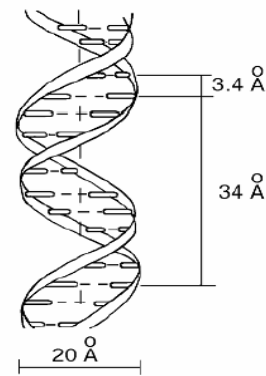
DNA

DNA از دو پلیمر خطی تشکیل یافته که هر یک از آنها ساخته شده از واحدهای مونومری هستند که نوکلئوتید نامیده می‌شود. هر نوکلئوتید شامل ۳ ترکیب قند، پایه هیدروکسیلی و فسفات می‌باشد. پایه‌ها دارای ۴ نوع مختلف هستند که با حروف C، T، G و A^۱ نمایش داده می‌شوند.

هر پلیمر که معمولاً یک رشته^۵ نامیده می‌شود، حامل اطلاعات ژنتیکی است. این رشته‌ها، اساس مارپیچ دوتایی DNA را تشکیل می‌دهند. چیدمان اصلی مولکول مذکور از دو بخش تشکیل شده که یکی را اسکلت^۶ و دیگری را نردبان DNA می‌نامند. اسکلت همان ترکیب قند-فسفات است و زوج پایه‌ها به قند در اسکلت متصل می‌گردد (شکل ۱).

در مارپیچ دوتایی، رشته‌ها حول یک محور فرضی چرخیده و ساختار مولکول راستگردی را به وجود می‌آورند. این ساختار توسط واتسون و کریک و از طریق پراش پرتو X تعیین شد [۱۲].

پایه‌ها در میان زنجیره قرار می‌گیرند و به وسیله پیوندهای هیدروژنی به یکدیگر متصل می‌گردند. دو پایه متصل به هم را "زوج پایه"^۷ می‌گویند و براساس قاعده چارگوف^۸ تنها دو نوع زوج پایه در DNA وجود دارد: جفت‌های T-A و G-C که



شکل ۱. ساختار نوع B مولکول DNA. اسکلت در اطراف و پایه‌ها با فاصله 3.4 \AA در میان قرار می‌گیرند. شکل برگرفته از مرجع [۲].

پیشنهاد شد. در این روش محدودیتی برای حضور جمله غیرخطی در پتانسیل برهم‌کنش وجود ندارد و بنابراین می‌توان با افزایش اثرات ناهماهنگ غیرخطی به بررسی حرکات با دامنه بلند در مدل‌های بهبود یافته دست یافت. در مدل انگلندر برای توصیف حالت‌های باز DNA تنها پایه‌های یک رشته DNA دچار چرخش می‌شوند و رشته دیگر به عنوان مولد پتانسیل در نظر گرفته می‌شود. پاسخ‌های سالیتون مانند معروف کینک و پاد کینک برای این مدل ناشی از معادله سینوسی گوردون بودند. اما ایرادی که نظریه پردازان به این مدل وارد کردند، ساده‌سازی‌های زیادی بود که در مدلسازی به کار رفته بود. بنابراین این مدل ابتدا توسط یوموسو [۶] و سپس توسط یاکوشویچ [۱] بهبود یافت. بدین ترتیب که حرکت چرخشی پایه‌های هر دو رشته در نظر گرفته می‌شود. در مقابل این مدل، مدل پیرارد و بیشاب [۷] معرفی شد که در آن فرض می‌شود حالت‌های باز زوج پایه‌ها (یا ذوب شدن مارپیچ دوتایی) توسط کشش پیوندهای هیدروژنی به وجود می‌آید. بنابراین به جای حرکت چرخشی پایه‌ها دو نوع حرکت جابه‌جایی برای آنها در نظر گرفته می‌شود. پیرارد همچنین به بررسی فیزیک آماری مولکول DNA پرداخته است [۸].

مدل‌های غیرخطی متنوع دیگری که در آن چرخش پایه‌ها در یک صفحه در نظر گرفته شده است توسط لیبسی و همکاران [۹] پیشنهاد شد. در مدل یاکوشویچ [۱] برهم‌کنش میان دو رشته با پتانسیل هوک در نظر گرفته شد. در کار گیتا [۱۰] اصلاحیه‌ای که در مدل یاکوشویچ اعمال شد به ازای طول اولیه

۱. Cytosine

۲. Thymine

۳. Guanine

۴. Adenine

۵. strand

۶. backbone

۷. Base-pair

۸. Chargoff

که در عبارت مربوط به T ، جملات نشان دهنده انرژی جنبشی مربوط به پایه‌های n هستند و I_1 و I_2 به ترتیب معرف گشتاور ماند برای پایه‌های زنجیره اول و دوم می‌باشند. در عبارت V_1 ، ε_1 و ε_2 به ترتیب نمایانگر برهم‌کنش میان پایه‌های همسایه در یک زنجیره هستند و $\phi_{n,1}$ و $\phi_{n,2}$ به ترتیب نشان دهنده تغییر زاویه پایه n از رشته اول و دوم می‌باشند. عبارت سوم در هامیلتونی نشان دهنده برهم‌کنش میان پایه‌های زنجیره اول و دوم است که در آن نشان‌دهنده نوع پایه‌های مورد بررسی می‌باشند، که شامل انواع AT، TA، CG و GC هستند.

پتانسیل $V_{\alpha\beta}$ را به شکل زیر تعریف می‌کنیم:

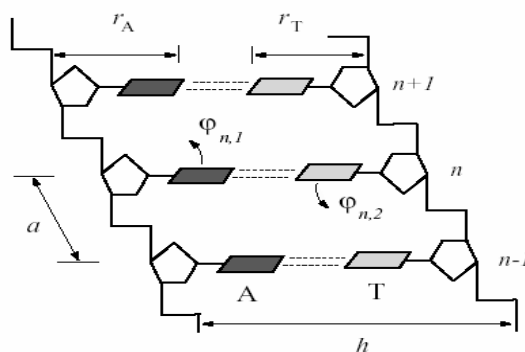
$$V_{\alpha\beta} = \frac{1}{4} K_{\alpha\beta} [R_n - R_n^0]^2 + \frac{1}{44} P_{\alpha\beta} [R_n - R_n^0]^4, \quad (2)$$

که در آن R_n^0 نشان دهنده فاصله پایه‌ها در حالت تعادل است. جمله اول سمت راست معرف انرژی پتانسیل هوک و جمله دوم تصحیح پیشنهادی ما می‌باشد. از آنجایی که نیروی بین مولکولی برای پیوند هیدروژنی نسبت به R_n^0 متقارن است، جمله درجه ۳ به دلیل عدم رعایت این تقارن کنار گذاشته شده است.

با توجه به هندسه مولکول، پس از مقداری محاسبه و ساده سازی‌های ریاضی خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} V_{\alpha\beta} = & K_{\alpha\beta} \left\{ r_1 (r_1 + r_2) (1 - \cos \phi_{n,1}) + r_2 (r_1 + r_2) \right. \\ & \times \left. (1 - \cos \phi_{n,2}) - r_1 r_2 [1 - \cos(\phi_{n,1} - \phi_{n,2})] \right\} \\ & + \frac{1}{4} P_{\alpha\beta} \left\{ r_1^4 (r_1 + r_2)^4 (1 - \cos \phi_{n,1})^4 + r_2^4 (r_1 + r_2)^4 \right. \\ & \times \left. (1 - \cos \phi_{n,2})^4 + r_1^2 r_2^2 [1 - \cos(\phi_{n,1} - \phi_{n,2})]^4 \right\} \quad (3) \\ & + 2r_1 r_2 (r_1 + r_2)^2 (1 - \cos \phi_{n,1}) (1 - \cos \phi_{n,2}) \\ & - 2(r_1^3 r_2 + r_1^2 r_2^2) (1 - \cos \phi_{n,1}) [1 - \cos(\phi_{n,1} - \phi_{n,2})] \\ & - 2(r_1^3 r_2 + r_1^2 r_2^2) (1 - \cos \phi_{n,2}) [1 - \cos(\phi_{n,1} - \phi_{n,2})], \end{aligned}$$

که در آن r_1 و r_2 به ترتیب نشانگر طول پایه چپ و راست در مارپیچ دوتایی DNA هستند. مقداری که برای $K_{\alpha\beta}$ که ثابت فنر در پتانسیل مدل فنر است و در آن α و β نشان دهنده زوج پایه مورد بررسی می‌باشند در کارهای عددی ارائه شده توسط یاکوشویچ $K_{AT} = 0.1834 \text{ m/N}$ بوده و مقدار پیشنهادی ما برای P که ثابت جمله اصلاحی است از مرتبه $10^{18} \text{ m}^3/\text{N}$ می‌باشد.



شکل ۲. مارپیچ دوتایی DNA شامل ۳ پایه AT با فاصله طولی $3/4 \text{ \AA}$ برگرفته از مقاله [۱].

زوج‌های AT از فراوانی بیشتری برخوردارند.

DNA مولکولی طویل است و طول آن در موجودات زنده و ارگان‌های مختلف این موجودات از چند متر تا چند سانتیمتر متغیر می‌باشد. از آنجایی که فاصله میان پایه‌ها در هر رشته DNA از مرتبه چند آنگستروم است. تعداد کل پایه‌های موجود در یک رشته از 10^8 تا 10^{11} زوج پایه متغیر خواهد بود. از طرف دیگر درباره ضخامت DNA می‌توان به ابعادی از مرتبه چند ده آنگستروم اشاره کرد که اجازه می‌دهد این مولکول را دارای ساختاری با ابعاد نانومتر بنامیم.

مولکول DNA دارای انواع مختلف A و B و Z است که نوع B دارای بیشترین فراوانی است و مبنای مطالعه ما قرار دارد.

DNA

در مدل استاندارد یاکوشویچ، نوع B از انواع مولکول DNA در نظر گرفته می‌شود که در شکل ۲ آمده است. هامیلتونی مربوطه به صورت زیر خواهد بود:

$$H = T + V_1 + V_2, \quad (1)$$

که کمیات V_1 و V_2 و T به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$T = \sum_n \frac{1}{2} I_1 \dot{\phi}_{n,1}^2 + \frac{1}{2} I_2 \dot{\phi}_{n,2}^2,$$

$$V_1 = \varepsilon_{n,1} \sin^2 \left(\frac{\phi_{n+1,1} - \phi_{n,1}}{2} \right) + \varepsilon_{n,2} \sin^2 \left(\frac{\phi_{n+1,2} - \phi_{n,2}}{2} \right),$$

$$V_2 = V_{\alpha\beta},$$

جدول ۱. مقادیر مربوط به پارامترهای m_a و r_a و I_a برای تمام حالت‌های α برگرفته از [۱].

α	$m_a (m_p)$	$r_a (A)$	$I_a (10^{-27} m^2 kg)$
A	۱۳۵/۱۳	۵/۸	۷۶۰۷/۰۳
T	۱۲۶/۱۱	۴/۸	۴۸۶۲/۲۸
C	۱۵۱/۱۴	۵/۷	۸۲۱۷/۴۴
G	۱۱۱/۱۰	۴/۷	۴۱۰۶/۹۳

شایان ذکر است مبنای پیشنهاد ما به ازای تغییر نمودار پاشندگی این مدل از مدل یاکوشویچ انتخاب شده است. هر چند این مقدار ضریب بزرگی است، اما با توجه ضرب شدن این ضریب در توان چهارم طول پایه‌ها در معادلات به تصحیح کوچکی از مرتبه 10^{-22} منجر می‌شود. سایر مقادیر عددی در جدول ۱ آمده است.

معادلات حرکت سیستم که برای هامیتونی مربوط به ماکرومولکول نوشته می‌شود به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} I_{n,1} \ddot{\phi}_{n,1} &= \frac{\partial H}{\partial \phi_{n,1}}, \\ I_{n,2} \ddot{\phi}_{n,2} &= \frac{\partial H}{\partial \phi_{n,2}}. \end{aligned} \quad (4)$$

اگر مولکول را به صورت همگن در نظر بگیریم، بدین معنا که در هر زنجیره تنها یک نوع زوج پایه وجود داشته باشد، خواهیم داشت:

$$I_{n,1} = I_1, \quad I_{n,2} = I_2$$

حال با در نظر گرفتن موج تخت با دامنه کم جواب‌هایی به شکل زیر داریم:

$$(\phi_{n,1}(t), \phi_{n,2}(t)) = (\phi_{n,1}, \phi_{n,2}) A e^{i(qna - \omega t)}, \quad (5)$$

که باید این جواب‌ها را در معادلات حرکت قرار دهیم. در اینجا $(\phi_{n,1}, \phi_{n,2})$ برداری دو بعدی است که به یک نرمالیزه شده است. $A \ll \pi$ دامنه و q عدد موج است. به سادگی می‌توان نشان داد که برای یک موج تخت معادله پاشندگی زیر را خواهیم داشت:

$$\omega^4 - B\omega^2 + C = 0, \quad (6)$$

که در آن:

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{I_1 I_2} \left[(I_1 + I_2) k \left(\epsilon + \frac{16A^2}{\epsilon} \right) \sin^2 \frac{qa}{2} \right. \\ &\quad \left. + K_{\alpha\beta} (r_1 + r_2)^2 \left(1 - \frac{A^2}{\epsilon} \right) (I_1 r_1 + I_2 r_2) \right], \\ C &= \frac{1}{I_1 I_2} \left\{ k K_{\alpha\beta} (r_1 + r_2)^2 \left(\epsilon + \frac{16A^2}{\epsilon} \right) \sin^2 \frac{qa}{2} \right. \\ &\quad \left. + K_{\alpha\beta}^2 r_1 r_2 \left(1 - \frac{A^2}{\epsilon} \right)^2 + k^2 \left(\epsilon + \frac{16A^2}{\epsilon} \right)^2 \sin^2 \frac{qa}{2} \right. \\ &\quad \left. - \left[\frac{1}{\epsilon} P_{\alpha\beta} A^2 (r_1 + r_2)^2 \right]^2 r_1 r_2 \right\}. \end{aligned} \quad (7)$$

در اینجا $k = \frac{\epsilon}{\rho}$ سختی برهم‌کنش میان پایه‌های همسایه در یک زنجیره است. برای به دست آوردن معادله پاشندگی (۶)، بسط توابع مثلثاتی تا تقریب مرتبه سوم در نظر گرفته شده است. نمودار مربوط به معادله پاشندگی دارای دو شاخه زیر می‌باشد:

$$\begin{aligned} \omega_o(q) &= \left[B + \sqrt{B^2 - 4C} \right]^{\frac{1}{2}}, \\ \omega_a(q) &= \left[B - \sqrt{B^2 - 4C} \right]^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (8)$$

که شاخه بالایی نشان دهنده فونون‌های اپتیکی و شاخه پایینی نشان دهنده فونون‌های آکوستیکی در زنجیره است.

بر اساس تخمین‌های زده شده در [۱] برای مطالعات عددی بهتر است مقادیر مشخصی برای پارامترهای مختلف در نظر بگیریم. بدین ترتیب یک مقدار مناسب نمونه برای ϵ برابر با 6000 mol/kJ و برای K 0.8714 m/N است. نمودار مربوط به رابطه پاشندگی برای یک زنجیره همگن در شکل ۳ آمده است. در این جا لازم به ذکر است که واحد رایج برای فرکانس cm^{-1} است که از رابطه معروف $\nu = \frac{c}{\lambda}$ به دست می‌آید. از آنجایی که در نمونه‌های عملی از اسپکتروسکوپی رامان برای سنجش فرکانس بیومولکول‌ها استفاده می‌شود و در این روش اندازه‌گیری طول موج مرسوم‌تر است، لذا استفاده از واحد cm^{-1} نسبت به همتای SI آن یعنی Hz برتری دارد. بر این اساس داریم:

$$1 \text{ THz} = 33/36 \text{ cm}^{-1}$$

موجی با پروفایل ثابت و تغییرات آرام باشد [۱]. برای یافتن این جواب‌ها بهتر است به بررسی حالت پیوسته بپردازیم که لاگرانژی آن به صورت زیر است:

$$L = \frac{1}{2} I_1 \dot{\phi}^2 + \frac{1}{2} I_2 \dot{\phi}'^2 - \frac{1}{2} \varepsilon \left(\frac{a}{\rho} \phi \right)^2 - \frac{1}{2} \varepsilon \left(\frac{a}{\rho} \phi' \right)^2 - V \quad (9)$$

برای دسترسی به معادلات حرکت از وردش لاگرانژی استفاده می‌کنیم. بدین ترتیب که:

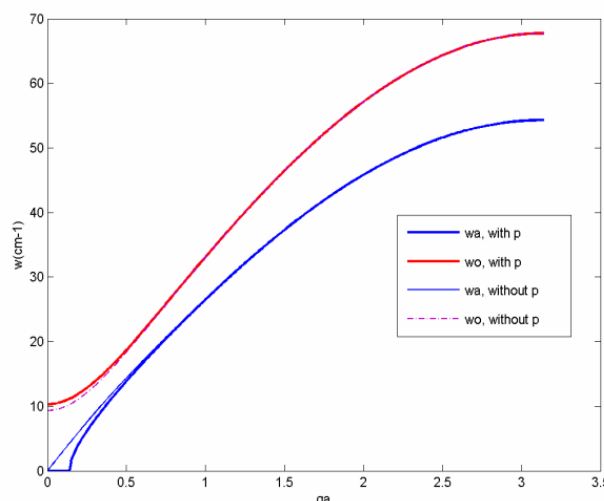
$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial L}{\partial \phi'} \right) - \frac{\partial L}{\partial \phi} = 0, \quad (10)$$

با جاگذاری لاگرانژی در روابط (۱۰) معادلات حاکم بر ϕ و ϕ' را خواهیم داشت. با استفاده از متغیرهای ζ و τ که متغیرهای بدون بعد هستند و به صورت $\zeta = \frac{x}{x_0}$ و $\tau = \frac{t}{t_0}$ تعریف می‌شوند، معادلات حرکت را بی‌بعد می‌کنیم و بنابراین به روابط زیر خواهیم رسید:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tau^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial \zeta^2} = & -\sin \phi + \frac{\nu r_1 r_2 x_0^2 K}{\varepsilon a^2} \sin(\phi - \phi') \\ & + \frac{\nu P x_0^2}{\varepsilon a^2} \{ \nu r_1^2 (r_1 + r_2)^2 (1 - \cos \phi) \sin \phi \\ & + \nu r_1^2 r_2^2 [1 - \cos(\phi - \phi')] \sin(\phi - \phi') \\ & + \nu r_1 r_2 (r_1 + r_2)^2 (1 - \cos \phi) \sin \phi \\ & - \nu (r_1^2 r_2 + r_1 r_2^2) [\sin \phi (1 - \cos(\phi - \phi')) \\ & + (1 - \cos \phi) \sin(\phi - \phi')] \\ & - \nu (r_1^2 r_2 + r_1 r_2^2) (1 - \cos \phi) \sin(\phi - \phi') \}, \end{aligned} \quad (11)$$

و

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi'}{\partial \tau^2} - \frac{\partial^2 \phi'}{\partial \zeta^2} = & -\sin \phi' + \frac{\nu r_1 r_2 x_0^2 K}{\varepsilon a^2} \sin(\phi - \phi') \\ & + \frac{\nu P x_0^2}{\varepsilon a^2} \{ \nu r_2^2 (r_1 + r_2)^2 (1 - \cos \phi') \sin \phi' \\ & + \nu r_1^2 r_2^2 [1 - \cos(\phi - \phi')] \sin(\phi - \phi') \\ & + \nu r_1 r_2 (r_1 + r_2)^2 (1 - \cos \phi') \sin \phi' \\ & - \nu (r_1^2 r_2 + r_1 r_2^2) [\sin \phi' (1 - \cos(\phi - \phi')) \\ & + (1 - \cos \phi') \sin(\phi - \phi')] \\ & - \nu (r_1^2 r_2 + r_1 r_2^2) (1 - \cos \phi') \sin(\phi - \phi') \}, \end{aligned} \quad (12)$$



شکل ۳. شاخه‌های اپتیکی و آکوستیکی رابطه پاشندگی برای یک مولکول DNA همگن. $(AT = \alpha\beta)$ به ازای $\varepsilon = 6000 \text{ mol/kJ}$ و $K = 0.8714 \text{ m/N}$. شاخه‌های بالایی و پایینی به ترتیب شاخه‌های اپتیکی و آکوستیکی به ازای افزایش جمله اصلاحی با مقدار عددی $p = 10^{-18}$ (نمودارهای پرتگ‌تر با جمله اصلاحی می‌باشند).

اختلاف مشاهده شده به ازای افزایش جمله اصلاحی از دو منظر قابل بررسی است: نخست آنکه این نمودار دارای تفاوتی از مرتبه 10^{-2} به ازای $p = 10^{-17} \text{ N/m}^2$ است در حالی که این تفاوت به ازای $p = 10^{-18} \text{ N/m}^2$ از مرتبه 10^{-1} خواهد بود. همچنین منحنی در نقطه صفر دارای یک قسمت موهومی می‌باشد. این بخش موهومی که در اعداد موج پایین (qa بین ۰ تا ۰/۱) ظاهر می‌شود به معنای جذب در آن نواحی در کریستال مورد بررسی است. شایان ذکر است که به ازای مقادیر کوچک‌تر برای p تفاوت خاصی در نمودار پاشندگی قابل مشاهده نبوده و همین موضوع اساس پیشنهاد مقدار عددی p در این مطالعه می‌باشد.

پیچیدگی معادلات حرکت غیر خطی و جفت شده اجازه انجام مطالعات تحلیلی را به ما نمی‌دهد. لذا لازم است برای یافتن جواب‌های سالیون مانند، به بررسی‌های عددی بپردازیم.

برای این کار ابتدا باید مولکول همگن DNA را در نظر بگیریم. (یعنی مانند قبل فرض کنیم $I_{n,2} = I_2$ و $I_{n,1} = I_1$). اکنون انتظار داریم که جواب‌های معادلات حرکت به صورت

که با توجه به شباهت سالیتون با ذره نامگذاری شده‌اند. بار سالیتون از رابطه $Q = \int J^\mu dx$ به دست می‌آید که در آن J^μ جریان توپولوژیک است و از رابطه

$$J^\mu = \frac{1}{2\pi} \sum_\nu \varepsilon^{\mu\nu} \frac{\partial \phi}{\partial x^\nu}$$

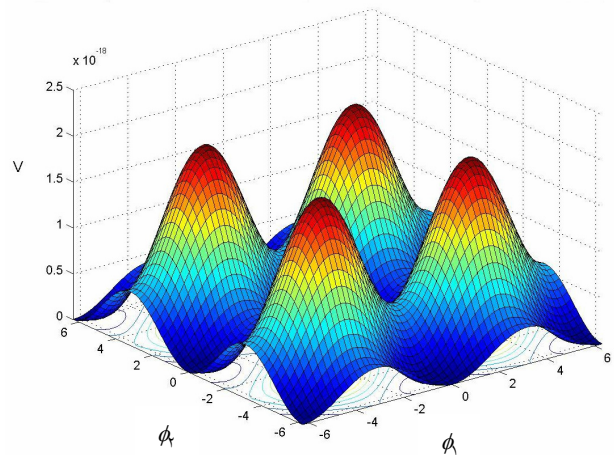
به دست می‌آید. این مقدار برای پاسخ‌های کینک برابر با ۱+ و برای پاسخ‌های پاد کینک ۱- است. در رابطه فوق، $x^0 = t, x^1 = x$

حال اگر سیستم را از وضعیتی نزدیک به پاسخ استاتیک رها کنیم، چندین بار حول حالت کمینه انرژی نوسان کرده و نهایتاً به وضعیتی می‌رسد که حاکی از جواب‌های پایدار مورد نظر ما می‌باشد. شیوه‌ای که برای یافتن هر چه سریع‌تر پاسخ‌های پایدار در این کار استفاده شده، توقف‌های پیاپی در سیستم دینامیکی است. بدین ترتیب که برای مقدار در هر مکان و در یک لحظه معین، میانگینی وزن دار از مقدار در آن مکان در همان لحظه و لحظه قبل را در نظر می‌گیریم. در این روش می‌توان برای بهبود هر چه بیشتر از وزن‌های مختلف در میانگین‌گیری استفاده کرد. یعنی:

$$\phi_{i,j} = \delta \phi_{i,j+1} + (1-\delta) \phi_{i,j} \quad (13)$$

ما برای به دست آوردن مقدار بهینه δ ، ابتدا روش را برای معادله سینوسی گوردون و معادله ϕ^6 آزمودیم. برای معادله سینوسی گوردون $\delta = 0/05$ و برای معادله ϕ^6 ، $\delta = 0/06$ مناسب‌ترین وزن می‌باشند. لذا پیشنهاد می‌شود که در کارهای عددی از وزنی میان $0/03$ تا $0/09$ استفاده شود که به معنای توقف بسیار کوتاه در سالیتون مورد بررسی است. لازم به ذکر است برای وزن‌های پایین‌تر سالیتون دچار نوسان شده و به جواب پایدار نمی‌رسد.

از آنجایی در این مقاله در صدد توصیفی از مدل یاکوشویچ بوده‌ایم، از $\alpha\beta = AT$ استفاده می‌کنیم. با اعمال روش ذکر شده در بخش قبل، جواب به صورت شکل ۵ و ۶ به ترتیب با بارهای توپولوژیک $q = (1, 1)$ و $q = (1, 0)$ به دست آمد. در شکل ۵ منحنی‌های پیوسته و خط چین ϕ و ϕ با در نظر



شکل ۴. منحنی پتانسیل بر حسب ϕ_1 و ϕ_2 .

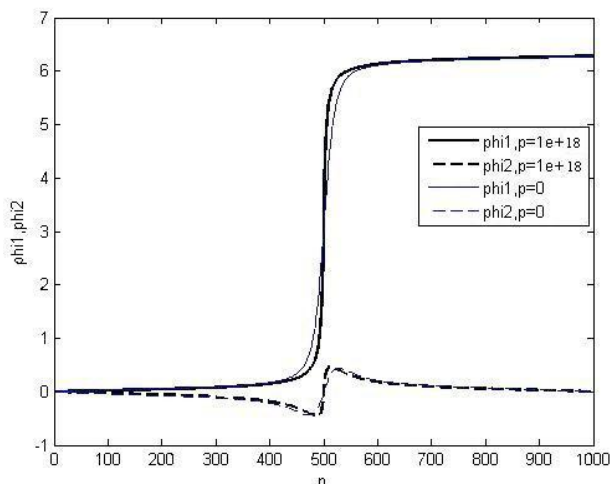
که در آنها ثابت x_0 را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$x_0 = a \left(\frac{\varepsilon}{2r_1(r_1 + r_2)k} \right)$$

چنانچه پیداست برای حل معادلات (۱۱) و (۱۲) باید از روش‌های عددی یاری جست.

برای حل معادلات استاتیک، می‌توان از روش‌های استاندارد، مثل روش رونگه - کوتای مرتبه ۴ استفاده کرد. با این همه، ما در این بخش به معرفی شیوه‌ای نو می‌پردازیم که بر اساس کمینه سازی انرژی استوار است. در ابتدا از روش‌های عددی موجود برای حل معادله دیفرانسیل جزئی استفاده می‌کنیم. بدین ترتیب که برای به دست آوردن مقدار عددی زوایا در هر نقطه از نقاط مجاور آن استفاده می‌کنیم.

شایان ذکر است منحنی‌هایی که به عنوان فرض اولیه انتخاب شده‌اند شامل دو خط راست با شیب ثابت می‌باشند. برای تعیین شرایط مرزی نیاز به شکل پتانسیل داریم. در این حالت نقاط خلا در پتانسیل به عنوان حدود سالیتون در نظر گرفته می‌شوند. شکل ۴ پتانسیل مدل مورد نظر را نشان می‌دهد. با توجه به شکل تناوبی پتانسیل مورد بحث، نقاط مختلفی را می‌توان به عنوان خلا در نظر گرفت که این مقدار تعیین کننده بار توپولوژیک سالیتون خواهد بود. بار و جرم در نظریه سالیتون مفاهیمی انتزاعی هستند



شکل ۶. سالیتون‌های ایستا با بار توپولوژیک $q=(1,0)$.

منحنی‌های خط چین و پیوسته پرننگ به ترتیب نمایانگر ϕ_1 و ϕ_2 با در نظر گرفتن جمله اصلاحی می‌باشند و منحنی‌های کم‌رنگ بدون در نظر گرفتن این جمله می‌باشند.

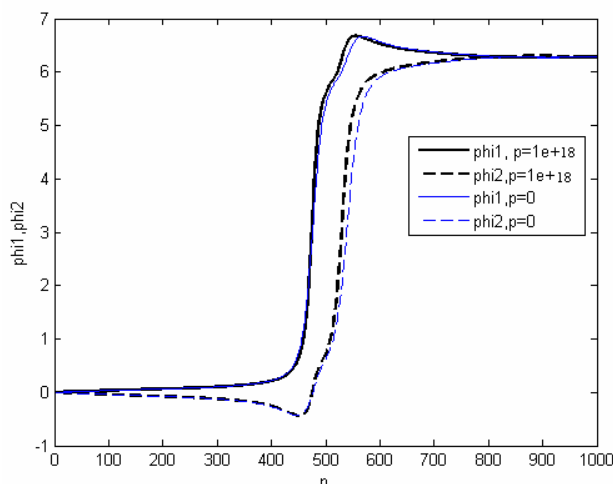
اصلاحی $(p=N/10^{18} \text{ m}^3)$ برابر با $1/39 \times 10^{-1} \text{ mol/J}$ است، درحالی‌که بدون در نظر گرفتن این جمله دارای مقدار $8/76 \times 10^{-2} \text{ J/mol}$ می‌باشد.

با توجه به شکل ۶، برای سالیتون با بار توپولوژیک $q=(1,0)$ نمودار شباهت بیشتری به سالیتون جواب برای معادله سینوسی گوردون دارد و اثری از قله‌های شکل ۵ در آن نیست. بنابراین پاسخی نزدیک به پاسخ سینوسی گوردون داریم که از معادله زیر به دست می‌آید:

$$\phi = 4 \arctan(\exp(x))$$

با در نظر گرفتن جمله اصلاحی شاهد فشردگی در منحنی مربوط به ϕ_1 و پهن شدگی در منحنی ϕ_2 می‌باشیم.

با به‌کار بردن مدل یاکوشویچ و افزودن جمله اصلاحی در پتانسیل برهم‌کنش میان دو رشته DNA، به بررسی تحلیلی معادله پاشندگی و بررسی عددی پاسخ‌های سالیتونی پرداختیم. نتایج مشاهده شده در رابطه پاشندگی شامل تغییر در ثابت‌های تعریف شده B و C (رابطه ۷) و درنمودار پاشندگی شامل تغییراتی از مرتبه ۰/۱ در فرکانس و حصول مقداری



شکل ۵. سالیتون‌های ایستا با بار توپولوژی $q=(1,1)$.

منحنی‌های پیوسته و خط چین پرننگ به ترتیب نشان‌دهنده ϕ_1 و ϕ_2 با وجود جمله اصلاحی هستند و منحنی‌های کم‌رنگ مربوط به مدل اصلی بدون وجود این جمله می‌باشند.

گرفتن جمله اصلاحی و منحنی‌های خط-نقطه و نقطه-نقطه مربوط به ϕ_1 و ϕ_2 و بدون در نظر گرفتن این جمله می‌باشند. در شکل ۶ منحنی‌های خط چین و پیوسته پرننگ به ترتیب نمایانگر ϕ_1 و ϕ_2 و با در نظر گرفتن جمله اصلاحی می‌باشند در حالی‌که منحنی‌های کم‌رنگ مربوط به حالتی است که جمله اصلاحی را در نظر نگرفته باشیم.

با بررسی زوج پایه G-C، به دلیل افزایش مقدار $K_{\alpha\beta}$ که نشانگر سختی میان پیوندهای هیدروژنی در زوج پایه‌ها است تا ۱/۵ برابر (به دلیل حضور دو پیوند هیدروژنی در زوج T-A و سه پیوند در زوج G-C) تصحیح رابطه با P کوچک‌تری اتفاق می‌افتد. شایان ذکر است با در نظر گرفتن زوج G-C، علاوه بر افزایش مقدار $K_{\alpha\beta}$ مقادیر I_1 و I_2 و r_1 و r_2 نیز تغییر می‌کنند. با اعمال روش مشابه برای این زوج پایه و ضریب تصحیح $P=5 \times 10^6$ به پاسخ‌های یکسان شکل ۵ و ۶ دست می‌یابیم.

چنانچه از شکل ۵ پیدا است، با در نظر گرفتن جمله اصلاحی، منحنی‌های مورد نظر دچار فشردگی در ناحیه مرکزی سالیتون شدند. همچنین قله‌های موجود به شکل تیزتر نمایان شده‌اند. انرژی کل سالیتون با در نظر گرفتن جمله

است در اینجا ما تنها یک سالیتون را در هر رشته بررسی کردیم در حالی که با توجه پهنای سالیتون و طول DNA، در صورت اعمال تحریکات لازم، تعداد زیادی سالیتون می‌تواند در هر مولکول DNA به وجود آید.

مقدار p را علی‌الاصول بایستی بتوان با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی به دست آورد. از آنجا که ما به مقدار واقعی این پارامتر واقف نبودیم، محاسبات عددی را برای انتخاب‌های متفاوت p انجام دادیم. با نزدیک شدن p به مقدار 10^{16} m^3 تغییرات در شکل و انرژی سالیتون اصلاح پیشنهادی نسبت به مدل یاکوشویچ ظاهر می‌گردد.

موهومی در نزدیکی نقطه صفر می‌شود که به معنای جذب در آن محدوده می‌باشد.

در حل عددی معادلات حرکت، به ازای افزایش ضریب جمله اصلاحی شاهد فشردگی سالیتون بوده و قله‌های تیزتری را می‌بینیم. همچنین انرژی مود سالیتونی، با در نظر گرفتن جمله اصلاحی از $8/76 \times 10^{-2} \text{ J/mol}$ به $1/39 \times 10^{-1} \text{ J/mol}$ افزایش می‌یابد (برای $p = 10^{18} \text{ N/m}^3$).

با توجه به شکل تعداد پایه‌های شرکت کننده در یک سالیتون حدود 800 پایه است و از آنجایی که فاصله پایه‌ها از هم در DNA-B برابر با $3/4 \text{ \AA}$ است، بنابراین پهنای سالیتون 2720 \AA معادل 272 نانو متر پیش بینی می‌شود. لازم به ذکر

6. S Yomosa, *Phys. Rev. A* **27**(1983) 2120.
7. M Peyrard and A R Bishop, *Phys. Rev. Lett* **62** (1989) 2755.
8. M Peyrard, *Nonlinearity*, **17** (2004) 2.
9. V Lisy and V K Fedyanin, *Journal of Biological Physics* **18** (1991) 12.
10. G Geata, *Phys. Rev. E*, (2006) 021921.
11. R D Leo, S Demelio, *International Journal of Non-Linear Mechanics*, **43** (2007) 1029.
12. J D Watson and F N C Crick, *Nature* **171** (1953) 737.

1. LV Yakushevich, A V Savin, L I Manevitch, *Phys. Rev. E* **66**(2002)016614.
2. LV Yakushevich, "Nonlinear Physics of DNA," Wiley, second edition, (2004).
3. J A McCommon, S C Harvey, "Dynamics of proteins and nucleic acids," Cambridge University Press (1987).
4. M Levitt, *Quant. Biol.* **47** (1983) 251.
5. S W Englander, N R Kallenbach, A J Heeger and J A Krumhansl, A . Litwin, *Proc. Nat. Acad. Sci .U.S.A* **77** (1980) 7222.