Ф.Б.БЕЛИСАРОВА, Т.А.КОЖАМКУЛОВ, Т.Р.МЫРЗАКУЛ, Г.Н.ШАЙХОВА, М.А.РАЙЫМКУЛОВ, Г.К.КИЯЗОВА, Р.МЫРЗАКУЛОВ

ФРАКТАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЗАРЯДА В КОДИРОВАННОЙ МОЛЕКУЛЕ ДНК

Представлена модифицированная модель электромагнитных свойств ДНК. Движение заряда вдоль пар оснований описывается фрактальным модифицированным уравнением синус-Гордона, решение которого представлено в виде солитонов. В работе рассматривается динамика бризеров и их распространение в ДНК.

1. Введение. Исследования неоднородных систем, в частности неоднородной двухспиральной молекулы ДНК, показали, что данные системы могут быть апраксимированы самоподобными структурами - фракталами [1-16]. Такая возможность определена стохастической картиной потенциального поля взаимодействия ансамбля нуклеотидов, которая в свою очередь характеризуется генетическим кодом. В силу фрактальных свойств генетического кода [11-16], верно предположить фрактальные особенности потенциального поля, которые можно интерпретировать геометрией структуры.

Путь Ω - некоторое множество, определяющее геометрию рассматриваемой структуры, погруженное в n-мерное пространство Евклида R^n. Если $N(\varepsilon)$ – наименьшее число шаров, радиуса ε, необходимых для покрытия множества Ω, то можно определить размерность множества, называемого размерностью Хаусдорфа:

$$\mu = -\lim_{\varepsilon \to 0} \log N(\varepsilon) / \log \varepsilon .$$

Если это число не является целым, то множество Ω называют фракталом, а само число фрактальной размерностью. В работах [11-16] были рассмотрены некоторые значения фрактальных размерностей генетического кода путем R/S анализа и с помощью автокорреляционной функции, на основе которого построены фрактальные солитонные модели ДНК. Одно из важных направлений данного исследования является построение модели распространения заряженных частиц вдоль неоднородной кодированной ДНК. Это связано с бурно развивающимся направлением прикладной физики - молекулярной электроники. Один из наиболее интересных претендентов на использование в качестве электронного элемента является молекула ДНК. Экспериментальные исследования показали, что ДНК обладает уникальными управляемыми свойствами, а потому и расширяется спектр функциональности молекулы.

Исследования ДНК показали, что комбинирование нуклеотидов изменяет проводимость ДНК. Полная неоднородность распределения нуклеотидов и их энергий означает неоднородность потенциала системы, что приводит к возникновению локализаций (Андерсоновская локализация).

Целью данной работы является построение непрерывного уравнения движения заряда вдоль молекулы ДНК, длина которой значительно больше рассматриваемых областей возмущения.

2. Модель. Система, о которой идет речь, соответствует ДНК, закрепленной с двух сторон пластинами (условно слева и справа) и описываемой гамильтонианом [17]:

$$H = \sum_i \left[\frac{C}{2}\left(\dot{\phi}_{i+1,1} - \dot{\phi}_{i,3}\right)^2 + \frac{C_s + C_0}{2}\dot{\phi}_{i,2} + \frac{1}{L}\left(\phi_{i,1} - \phi_{i,2}\right)^2 + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{L}\left(\phi_{i,2} - \phi_{i,3}\right)^2 - E_j \cos\left(\phi_{i+1,1} - \phi_{i,3}\right) + \frac{1}{L_0}\left(\phi_{i,0} - \phi_{i,2}\right)^2 \right], \quad (1)$$

где ϕ - потенциал, соответствующий i-тому нуклеотиду, C, C_0, C_s, L, E_j - параметры, характеризующие пару оснований. Суммирование происходит по парам оснований, таким образом, выражение в скобках соответствует энергии пары оснований. Энергия ансамбля пар оснований является суммой межпарных и внутрипарных энергий взаимодействия.

Внутрипарная связь системы определяется водородной связью, довольно слабой относительно ковалентной связи, формируемой между сегментами цепи. ГЦ-связь формируется тремя водородными связями, а АТ - двумя. Энергия во-

дородной связи порядка 0,5 эВ, а между парами - 1 эВ. Основания в результате различных возмущений, могут возбуждаться, при этом их энергия может достигать критического значения, при котором возможна ионизация. Энергия ионизации гуанина порядка 7,75 эВ, аденина - 8,24 эВ, цитозина - 8,87 эВ, и, наконец, тимина - 9,14 эВ. В результате ионизации в молекуле ДНК могут возникать исследуемые блуждающие электроны, образующие поток заряда q. Очевидно, что $\varphi \propto q$.

Если пары оснований однородны во всей системы, то возможен предельный переход:

$$H = \int dx \left\{ \frac{1}{2} L\dot{q}^2(x) + E_j \cos\theta(x) + \frac{1}{2}\frac{L_0}{2}\dot{q}_0^2(x) + \right.$$

$$+ \frac{1}{2C}(q(x) - R(x))^2 + \frac{1}{2C_s} q_x^2(x) +$$

$$\left. + \frac{1}{C_s} q_0(x) q_x(x) + \frac{1}{2C_{s0}} \dot{q}_0^2 + i\dot{\theta}(x) R(x) \right\}, \qquad (2)$$

однако для неоднородной, кодированной молекулы ДНК, необходимо применение фрактальной модели.

4. Фрактальное уравнение динамики распространения заряда. Лагранжиан рассматриваемой системы имеет вид:

$$\tilde{L} = \sum_i \left[\frac{C}{2}\left(\dot{\phi}_{i+1,1} - \dot{\phi}_{i,3}\right)^2 + \frac{C_s + C_0}{2}\dot{\phi}_{i,2} + \frac{1}{L}\left(\phi_{i,1} - \phi_{i,2}\right)^2 + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{L}\left(\phi_{i,2} - \phi_{i,3}\right)^2 + E_j \cos\left(\phi_{i+1,1} - \phi_{i,3}\right) - \frac{1}{L_0}\left(\phi_{i,0} - \phi_{i,2}\right)^2 \right], \qquad (3)$$

который в непрерывном пределе соответствует выражению:

$$\tilde{L} = \int dx \left\{ \frac{1}{2} L\dot{q}^2(x) - E_j \cos\theta(x) + \frac{1}{2}\frac{L_0}{2}\dot{q}_0^2(x) + \frac{1}{2C}(q(x) - \right.$$

$$- R(x))^2 + \frac{1}{2C_s} q_x^2(x) + \frac{1}{C_s} q_0(x) q_x(x) +$$

$$\left. + \frac{1}{2C_{s0}} \dot{q}_0^2 + i\dot{\theta}(x) R(x) \right\} \qquad (4)$$

или

$$\tilde{L}^{eff} = \int dx \left\{ \frac{1}{2} L\dot{q}^2 - \frac{2}{(2\pi)^2} E_j \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi}{e} q \right) \right] - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2(C_0 + C_s)} q_x^2 + \frac{C_0^2 L_0}{2(C_0 + C_s)^2} \dot{q}_x^2 \right\}. \qquad (5)$$

Для неоднородной кодированной молекулы ДНК имеем:

$$\tilde{L}^{eff} = \int dx_D \left\{ \frac{1}{2} L\dot{q}^2 - \frac{2}{(2\pi)^2} E_j \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi}{e} q \right) \right] - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2(C_0 + C_s)} q_x^2 + \frac{C_0^2 L_0}{2(C_0 + C_s)^2} \dot{q}_x^2 \right\}, \qquad (6)$$

где

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

D – показатель фрактальности.

Применяя уравнение Эйлера-Лагранжа для фрактальных сред:

$$C_1(D,x)\frac{\partial L}{\partial q} + \frac{\partial}{\partial x}\left(C_1(D,x)\frac{\partial L}{\partial q_x} \right) +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial t}\left(C_1(D,x)\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = 0, \qquad (7)$$

получим:

$$\frac{x^{D-1}}{\Gamma(D)}\left[\frac{2}{\pi e} E_s \sin\left(\frac{2\pi}{e} q \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{x^{D-1}}{\Gamma(D)}\left(\frac{1}{(C_0 + C_s)} q_x + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \frac{C_0^2 L_0}{(C_0 + C_s)^2} \ddot{q}_x \right)\right) +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{x^{D-1}}{\Gamma(D)}\left(L\dot{q} + \frac{1}{2}\frac{C_0^2 L_0}{2(C_0 + C_s)^2} \dot{q}_{xx} \right)\right) = 0 \qquad (8)$$

или

$$-\frac{2}{\pi e} E_s \frac{x^{D-1}}{\Gamma(D)} \sin\left(\frac{2\pi}{e} q \right) + \frac{D-1}{\Gamma(D)}\left(\frac{1}{(C_0 + C_s)} q_x + \right.$$

$$\left. + \frac{C_0^2 L_0}{(C_0 + C_s)^2} \ddot{q}_x \right) + \frac{x^{D-1}}{\Gamma(D)} \frac{1}{2} \frac{C_0^2 L_0}{2(L_0 + C_s)^2} \ddot{q}_{xx} -$$

$$- \frac{x^{D-1}}{\Gamma(D)} L\ddot{q} + \frac{x^{D-1}}{\Gamma(D)} \frac{1}{2} \frac{C_0^2 L_0}{2(L_0 + C_s)^2} \ddot{q}_{xx} = 0, \qquad (9)$$

откуда получаем:

$$-L\ddot{q} - \frac{2}{\pi e} E_s \sin\left(\frac{2\pi}{e} q \right) + \frac{D-1}{x} \frac{1}{(C_0 + C_s)} q_x +$$

$$+ \frac{D-1}{x} \frac{C_0^2 L_0}{(C_0 + C_s)^2} \ddot{q}_x + \frac{1}{(C_0 + C_s)} q_{xx} +$$

$$+ \frac{C_0^2 L_0}{4(L_0 + C_s)^2} \ddot{q}_{xx} - \frac{C_0^2 L_0}{4(L_0 + C_s)^2} \ddot{q}_{xx} = 0 \qquad (10)$$

или

$$-L\ddot{q}-\frac{2}{\pi e}E_s\sin\left(\frac{2\pi}{e}q\right)+\frac{D-1}{x}\frac{1}{(C_0+C_s)}q_x+$$

$$+\frac{D-1}{x}\frac{C_0^2L_0}{(C_0+C_s)^2}\ddot{q}_x+$$

$$+\frac{1}{(C_0+C_s)}q_{xx}+\frac{C_0^2L_0}{2(L_0+C_s)^2}\ddot{q}_{xx}=0. \qquad (11)$$

Преобразовав коэффициенты, окончательно получаем модифицированное уравнение синус-Гордона:

$$\ddot{q}+\sin q-\frac{D-1}{x}q_x-\frac{D-1}{x}\ddot{q}_x-q_{xx}-\ddot{q}_{xx}=0. \qquad (12)$$

Если D=1, переходим к нефрактальному уравнению распространения заряда вдоль ДНК:

$$\ddot{q}+\sin q-q_{xx}-\ddot{q}_{xx}=0, \qquad (13)$$

решение которого имеет вид кинка:

$$q=2arctg\left[\exp\left(-\frac{x-\vartheta t}{c}\right)\right]. \qquad (14)$$

Последнее выражение соответствует наблюдаемой локализации зарядов.

5. Бризерные решения. Рассмотрим поведение зарядов во фрактальной линеаризированной среде, считая $\sin q\approx q$. Такое поведение характеризуется бризерными возмущениями.

Рассмотрим стационарные возмущения зарядов, тогда уравнение (12) запишется в виде:

$$q_{xx}+\frac{D-1}{x}q_x-\sin q=0. \qquad (15)$$

Считая возмущение малоамплитудными, получаем:

$$q_{xx}+\frac{D-1}{x}q_x-q=0 \qquad (16)$$

или

$$xq_{xx}+(D-1)q_x-xq=0. \qquad (17)$$

Последнее уравнение можно решить в терминах Бесселевых функций:

$$q=C_1x^aJ_\nu(\beta x)+C_2x^aY_\nu(\beta x). \qquad (18)$$

В выражении (18) введены следующие замены:

$$D-1=1-2a, \qquad (19а)$$

$$a=1-\frac{D}{2}. \qquad (19б)$$

Поскольку $0<D<1$, то $\frac{1}{2}<a<1$. Так же сделана следующая замена:

$$\beta^2+\frac{a^2-\nu^2}{x^2}=\lambda^2, \qquad (20а)$$

откуда следует,

$$\beta^2=\lambda^2, \qquad (20б)$$

$$\nu=\pm\alpha=\pm\left(1-\frac{D}{2}\right). \qquad (20в)$$

Покажем так же, что нестационарный случай соответствует переходу к уравнению (15). Для нестационарного случая уравнение динамки распространения заряда имеет вид:

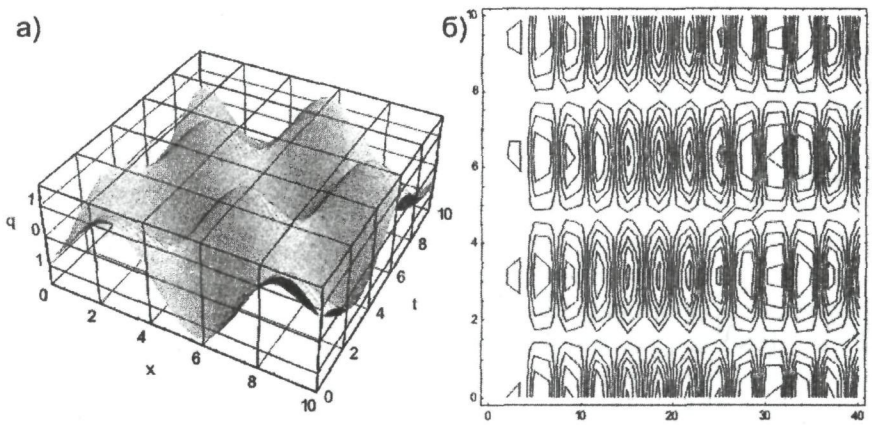
$$\ddot{q}+q-\frac{D-1}{x}q_x-\frac{D-1}{x}\ddot{q}_x-q_{xx}-\ddot{q}_{xx}=0. \qquad (21)$$

Решение будем искать методом разделения переменных

$$q=X(x)T(t),$$

тогда уравнение (20) принимает вид:

$$X\ddot{T}+XT-\frac{D-1}{x}\dot{X}T-\frac{D-1}{x}\dot{X}\ddot{T}-\ddot{X}T-\ddot{X}\ddot{T}=0 \qquad (22)$$



Бризерное возмущение заряда: а) график зависимости q(x,t) для малоамплитудных значений, б) график q(x,t) вид сверху

или

$$X(\ddot{T}+T)-\frac{D-1}{x}\dot{X}(T+\ddot{T})-\ddot{X}(T+\ddot{T})=0, \qquad (23)$$

откуда окончательно получаем:

$$(\ddot{T}+T)\left(X-\frac{D-1}{x}\dot{X}-\ddot{X}\right)=0, \qquad (24)$$

которое распадается на два независимых уравнения. Выражения в первой скобке

$$\ddot{T}+T=0$$

имеет тривиальное решение:

$$T=e^{it}. \qquad (25)$$

Выражение во второй скобке аналогично уравнению (15). На рис.1. представлено решение для нестационарного возмущения.

6. Заключение. В данной работе построено модифицированное солитонное уравнение синус-Гордона для динамики распространения заряда в кодированной молекуле ДНК. Было построено решение для малоамплитудных значений заряда для стационарного и нестационарного случая. Как следует из решения, показатель фрактальности оказывает влияние на решение.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Райымкулов М.А., Каныгина О.Н., Мырзакулов Р.* О нелинейных возбуждениях и нанофизике ДНК// Вестник ЕНУ им. Л.Н. Гумилева. – 2006. - № 6(52). – С. 62-70.

2. *Райымкулов М.А., Каныгина О.Н., Мырзакулов Р.* Кинкоподобные возбуждения и нанофизика ДНК// Вестник ЕНУ им. Л.Н. Гумилева. – 2007. - №2(54). – С. 108-118.

3. *Райымкулов М.А.* Фазовые пространства в молекуле ДНК с учетом фрактальности// Труды международной научной конференции молодых ученых «Наука и образование - 2007», ЕНУ им. Л.Н. Гумилева, 20-27 апреля, Астана 2007. – Т. 5а. – С. 145-150.

4. *Райымкулов М.А.* Уравнение динамики молекулы ДНК с учетом фрактальности// Материалы научно-методической конференции «Теория и методика обучения физико-математических дисциплин», КазНПУ им. Абая, Алматы, 26-27 апрель 2007. – С. 123-126.

5. *Raiymkulov M.A.* Nonlinear Dynamics of DNA with Low-Level Fractionality// Abstracts of the Seventh International Conference «Symmetry in Nonlinear Mathematical Physics» Kiev, Ukraine, June 24-30, 2007.

6. *Райымкулов М.А., Мырзакулов Р.* Нелинейная динамика фрактальной модели ДНК// Сборник трудов 5-ой международной конференции «Современные достижения физики и фундаментальное физическое образование», Алматы, 2007. – С. 30-31.

7. *Райымкулов М.А. , Мырзакулов Р.* Математическое моделирование нелинейных процессов в молекуле ДНК с учетом фрактальных структур// Материалы республиканской научной конференции «Моделирование механических систем и процессов», КарГУ им. Е.А. Букетова, Караганда, 2007. – С.195-197.

8. *Кожамкулов Т.А., Райымкулов М.А., Белисарова Ф.Б., Мырзакулов Р.* Нанодинамика движения солитона в гетероструктурной молекуле ДНК// Вестник КазНУ, серия физическая. - №2(24). - 2007. – С. 69-76.

9. *Кожамкулов Т.А., Райымкулов М.А., Белисарова Ф.Б., Мырзакулов Р.* Фрактальное уравнение динамики молекулы ДНК// Вестник КазНУ, серия физическая. – 2007. - №2(24). – С. 77-82.

10. *Кожамкулов Т.А., Райымкулов М.А., Белисарова Ф.Б., Мырзакулов Р.* Кинкоподобные решения для фрактальной модели молекулы ДНК// Известия НАН РК, серия физ.-мат. . – 2007. - №2(26). – С. 73-80.

11. *Райымкулов М.А.* Математическое моделирование генетического кода ДНК// Международная научно-практическая конференция студентов, магистрантов и молодых ученых «Ломоносов - 2008», тезисы докладов. – 2008. - №1. – С.175-176.

12. *Райымкулов М.А.* Возмущения кодированной молекулы ДНК// Материалы международной научной конференции молодых ученых, аспирантов и школьников «VIII Сатпаевские чтения», Павлодар. –2008. - Т. 18. – С. 276-281.

13. *Райымкулов М.А., Мырзакул Т.Р., Мырзакулов Р.* Моделирование генетической информации ДНК// Вестник ЕНУ им. Л.Н. Гумилева. - №2 (62). – 2008. – С.140-151.

14. *Райымкулов М.А., Мырзакул Т.Р., Мырзакулов Р.* О динамике кодированной молекулы ДНК// Вестник КазНУ, серия физическая. – 2008. - №2(26).

15. *Райымкулов М.А., Мырзакул Т.Р., Мырзакулов Р.* Фазовая траектория возмущения кодированной молекулы ДНК// Вестник КазНУ, серия физическая. – 2008. - №2(26).

16. *Райымкулов М.А.* Операторы дробного интегрирования в уравнении динамики ДНК // Сборник тезисов международной научной конференции «Актуальные вопросы теории дифференциальных уравнений с частными производными и их приложения», Астана, 15-17.09.08 – С. 59-60.

17. *Hermon Z., Ben-Jacob E.* and *Schon G.*//Phys. Rev. B. – 1996. - V.4. – P. 1234.

Резюме

Берілген жұмыста ДНҚ-ның электромагниттік қасиеттерінің моделі ұсынылған. Синус-Гордон теңдеуінің фракталдық түрі заряд қозғалысы теңдеуі болып табылады.

Summary

In this paper we present a modify electromagnetic model of DNA molecules. Excess charge in the model gives rise to two coupled modified fractal sine-Gordon equations, which admit topological solitonic excitations. We study the dynamics of the breathers, their effect on the DNA transport properties.