

## Modelos mecânicos para o estudo do DNA

**Gustavo F. Mazetto (IC)<sup>1</sup>, Pedro D. Pinto (PQ)<sup>1\*</sup>**

Universidade Federal do Oeste da Bahia, <sup>2</sup>Centro Multidisciplinar de Luís Eduardo Magalhães, CEP 47850-000, Luís Eduardo Magalhães, Bahia, Brasil.

\*E-mail: [pedro.dias@ufob.edu.br](mailto:pedro.dias@ufob.edu.br)

Palavras chave: DNA, sóliton, abertura de bases

### Abstract

*The DNA is the most important molecule in a living organism. The structure and conformation of DNA are fundamental to many biological processes. In this work, we will present the solution for two mechanical models of a specific biological process performed by the DNA: the base pair opening dynamics.*

### Introdução

Além de armazenar e transmitir o material genético, o DNA desempenha alguns processos biológicos, que ditam e regulam o organismo de um ser. Todos esses processos necessitam que o DNA altere sua conformação natural, e se configure de uma maneira mais conveniente para o processo acontecer. Desse modo, o estudo da mecânica do DNA assume crucial importância para entender todos estes mecanismos. Para estudar a dinâmica da molécula, é possível propor modelos mecânicos que imitam o DNA e, a partir destes modelos, obter resultados teóricos que aproximam das soluções do problema real. Este trabalho apresenta soluções de dois modelos mecânicos, o de Englander [1] e de Yakushevich [2]. O processo que será analisado em ambos os modelos é a abertura de bases da molécula

### Material e Métodos

O modelo de Englander [1] consiste em representar as duas cadeias da molécula de DNA em termos de pêndulos conectados por molas. Cada pêndulo simula uma base nitrogenada da molécula de DNA. A figura do modelo e a hamiltoniana do sistema podem ser vistos abaixo:

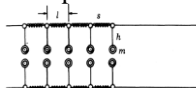


Figura 1. Modelo de Englander

$$H = \sum_n \frac{1}{2} m h^2 \left( \frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \sum_n m g h (1 - \cos\theta) + \sum_n \frac{S}{2} (\theta_n - \theta_{n-1})^2$$

Já para o modelo de Yakushevich [2], a construção se dá com duas cadeias de discos, que imitam as bases nitrogenadas da molécula de DNA. Neste modelo, há a presença da interação entre as duas cadeias da molécula. A figura do modelo e a hamiltoniana do sistema estão expressas a seguir:

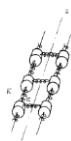


Figura 2. Modelo de Yakushevich.

$$H = \sum_{in} \frac{I_i \varphi_{in}^2}{2} + \sum_{i,n} \frac{k_i^1 \Delta l_{i,n,n+1}^2}{2} + \sum_n \frac{k^b (\Delta l)^2}{2}$$

### Resultados e Discussão

Para o modelo de Englander, a equação que descreve a abertura de bases de uma das cadeias é dada por:  $\theta = 4 \arctg[\exp(2nl/L)]$

O gráfico que ilustra a solução se encontra abaixo:

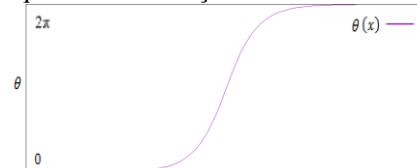


Figura 3. Solução do modelo de Englander.

Esta solução representa uma onda concentrada que se propaga com velocidade constante ao longo da cadeia do DNA. Ondas desse tipo são chamadas de “ondas solitárias” ou sólitons. Já para o modelo de Yakushevich, a solução é expressa por:  $\varphi_1(\xi) = -\varphi_2(\xi) = 4 \arctg[\exp(\xi - \xi_0)]$

Graficamente, a solução está expressa abaixo:

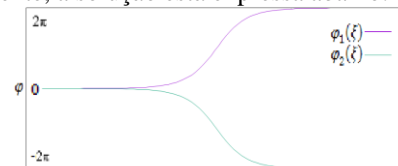


Figura 4. Solução do modelo de Yakushevich.

É possível ver que ocorre uma solução tipo-sóliton com abertura simultânea das duas cadeias do DNA e essa abertura das bases se propaga com velocidade constante ao longo das cadeias.

### Conclusões

Ao analisar os resultados dos modelos, verificamos que a solução do modelo generalizado de Yakushevich tem o mesmo perfil da solução de Englander e que a abertura das bases ocorre simultaneamente. Esses resultados juntamente com os parâmetros experimentais de energia das Hamiltonianas permitem estimar o número de bases envolvidas na dinâmica de abertura do DNA.

### Agradecimentos

À Universidade Federal do Oeste da Bahia, e ao professor Pedro Dias Pinto.

### Referências

- [1] S.W. Englander, N.R. Kallenbach, A.J. Heeger, J.A. Krumhansl, S. Litwin, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 77 (1980) 7222.
- [2] L.V. Yakushevich, Phys. Lett. A 136 (1989) 413.