

Dinâmica não linear da molécula de DNA

Gustavo F. Mazetto (IC)¹, Pedro D. Pinto (PQ)^{1*}

Universidade Federal do Oeste da Bahia, ¹Centro Multidisciplinar de Luís Eduardo Magalhães, CEP 47850-000, Luís Eduardo Magalhães, Bahia, Brasil.

*E-mail: pedro.dias@ufob.edu.br

Palavras chave: DNA, desnaturação, efeitos de não localidade.

Abstract

The dynamics of DNA have been studied with the use of mechanical models that simulate the molecule at the mesoscopic scale. One of these processes studied is the thermal denaturation of the DNA. This work will show a generalization of a mechanical model to investigate the effects of nonlocality in the denaturation process.

Introdução

Desnaturação térmica do DNA é o processo em que a dupla-fita da molécula perde a interação devido ao aumento de temperatura. A desnaturação foi estudada por Peyrard e Bishop [1] com o emprego de um modelo mecânico não linear. Este trabalho pretende investigar os efeitos de não localidade na desnaturação do DNA através de uma generalização do potencial harmônico apresentado no trabalho [1].

Material e Métodos

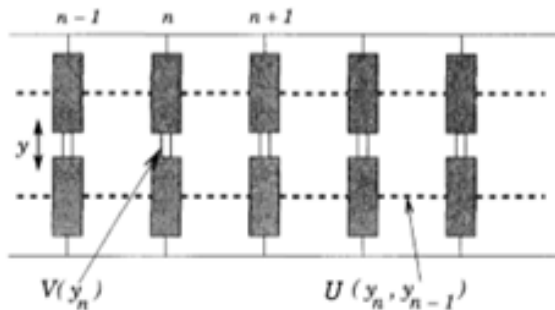


Figura 1. Modelo de Peyrard-Bishop [2].

A Hamiltoniana do modelo pode ser expressa por:

$$H = \sum_n \left\{ \frac{q_n^2}{2m} + \frac{1}{2} k(y_n - y_{n-1})^2 + D[\exp(-a\sqrt{2}y_n) - 1]^2 \right\}$$

A função de partição do problema é dada por:

$$Z_y = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_n \exp[-\beta f(y_n, y_{n-1})]$$

A integral pode ser avaliada usando os autovalores e autofunções do operador integral de transferência:

$$\int dy_{n-1} \exp[-\beta f(y_n, y_{n-1})] \varphi_i(y_{n-1}) = e^{-\beta \epsilon_i} \varphi_i(y_n)$$

Resultados e Discussão

Com o operador integral de transferência, obtemos a equação de Schrödinger para o modelo PB:

$$-\frac{1}{2k\beta^2} \frac{d^2 \varphi_0(y_n)}{dy_n^2} + D(e^{-2a\sqrt{2}y} - 2e^{-a\sqrt{2}y}) \varphi_0(y_n) = (\epsilon_i - s_0 - D) \varphi_0(y_n)$$

O estiramento da ligação de hidrogênio é dada por:

$$\langle y \rangle = \langle \varphi_0(y) | y | \varphi_0(y) \rangle = \int \varphi_0^2(y) y dy$$

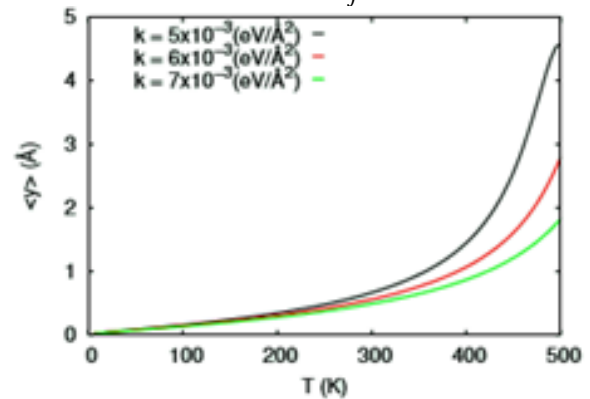


Figura 2. Desnaturação térmica no modelo PB.

A generalização se dá com a troca do potencial harmônico por um potencial não local:

$$\sum_n \frac{1}{2} k(y_n - y_{n-1})^2 = \sum_{n \neq m} \frac{C}{2} g_{n-m} [y_m - y_n]^2$$

Aplicando o operador para o caso não local, obtemos a equação de Schrödinger para o modelo generalizado:

$$\left\{ \sum_m \frac{1}{4\lambda_m} \frac{d^2}{dy_n^2} - \beta V(y_n) + \frac{1}{2} \ln \left[\frac{(2\pi)^N}{\beta C \prod_m g_{n-m}} \right] \right\} \phi_0(y_n) = -\beta \epsilon_0 \phi_0(y_n)$$

Conclusões

O trabalho apresentou uma proposta de generalização do modelo mecânico de PB. A solução da equação de Schrödinger para o caso não local fornecerá o comportamento da desnaturação térmica para o modelo generalizado.

Agradecimentos

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

Referências

- [1] M. Peyrard, A.R. Bishop, Phys. Rev. Lett. 62 (1989) 275.
- [2] M. Peyrard, S. Cuesta-López, D. Angelov, J. Phys. Condens. Matter, 21 (2009) 034103.