

Modelagem mesoscópica 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: desnaturação do DNA, efeitos de não localidade, campo externo.

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 *et al.* [1] com o emprego de um modelo mecânico não linear (Modelo PB). Este trabalho apresenta uma generalização do modelo PB de modo que as interações não locais sejam englobadas no estudo. De posse deste modelo generalizado, verificamos a influência dos efeitos não locais e de campo externo no processo de desnaturação.

Materiais e Métodos

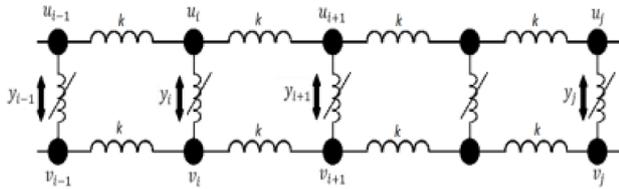


Figura 1. Modelo de Peyrard-Bishop.

A Hamiltoniana do modelo PB é dada por

$$H_{PB} = \sum_i \left\{ \frac{q_i^2}{2m} + \frac{1}{2} k (y_i - y_{i-1})^2 + D [\exp(-a\sqrt{2}y_i) - 1]^2 \right\}$$

Introduzindo as interações não locais no modelo, temos:

$$H = \sum_i \left\{ \frac{q_i^2}{2m} + \sum_j \frac{C}{2} g_{i-j} [y_j - y_i]^2 + D [\exp(-a\sqrt{2}y_i) - 1]^2 \right\}$$

A função de partição do problema não local é dada por:

$$Z_y = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i=1}^N dy_i e^{-\beta f(y_j, y_i)}$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy_j e^{-\beta f(y_i, y_j)} \varphi_n(y_j) = e^{-\beta \epsilon_n} \varphi_n(y_i)$$

Resultados e discussão

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

$$\left\{ -\sum_j \frac{1}{2\lambda_j} \frac{d^2}{dy_i^2} + \beta V(y_i) - \frac{1}{2} \ln \left[\frac{(2\pi)^N}{\beta C \prod_j g_{i-j}} \right] \right\} \phi_0(y_i) = \beta \epsilon_0 \phi_0(y_i)$$

O estiramento da ligação de hidrogênio é dada por:

$$\langle y \rangle = \langle \phi_0(y) | y | \phi_0(y) \rangle = \int \phi_0^2(y) y dy$$

O gráfico abaixo mostra o estiramento médio da ligação de hidrogênio para vários valores de interações não locais (N):

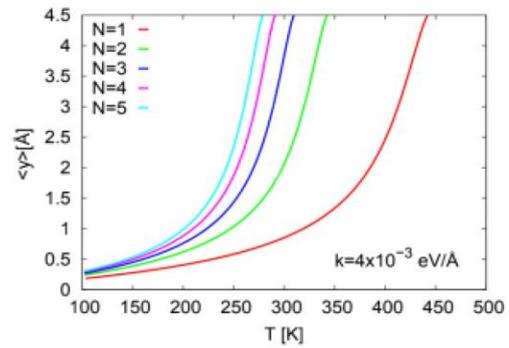


Figura 2. Desnaturação térmica do modelo não local.

Para analisarmos a influência de um campo externo linear da forma $\Theta(y) = \Theta_0 y$, introduzimos este termo na equação de Schrödinger e aplicamos o método descrito em [2].

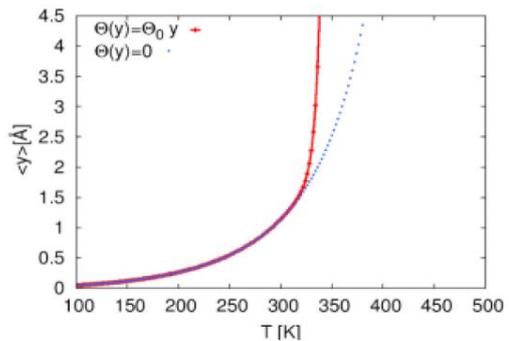


Figura 3. Desnaturação com a aplicação de um campo externo linear.

Conclusões

A desnaturação é facilitada com a introdução de efeitos de não localidade e com a aplicação de um campo externo.

Agradecimentos

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

Referência

[1] M. Peyrard. A.R Bishop, Phys. Rev. Lett. 62 (1989) 2755.