

ГИПЕРЗВУКОВАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ МЕЖНИТЕВЫХ МОД ДНК

В.Н. Блинов, В.Л. Голо

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
механико-математический факультет*

blinov.veniamin@gmail.com, voislav.golo@gmail.com

Поступила 30.05.10

Мы рассматриваем упругие моды ДНК, учитывая нерегулярность её последовательности нуклеотидов. Это позволяет применить теорию И.М. Лифшица о локализации колебаний в неупорядоченных средах и численно получить локализацию в ДНК, а также исследовать возможность накачки энергии в локализованные моды с помощью внешней звуковой волны гигагерцового диапазона посредством параметрического резонанса.

УДК 534.14, 534.13

1. Акустика гигагерцовых частот

Гиперзвук представляет интерес, с одной стороны, как явление физической акустики, существенно отличное от низкочастотных и даже ультразвуковых колебаний, и, с другой стороны, как мощный метод исследования конденсированных сред. Достиженные за последние годы успехи в разработке монохроматических источников гиперзвука (фононных лазеров) позволяют предположить, что роль гиперзвука как инструмента экспериментальных исследований будет возрастать. Несомненно, он также найдёт и важные технологические применения.

Исследование гиперзвука восходит к наблюдению броуновского движения 150 лет назад. Как известно, это явление длительное время не находило адекватного объяс-

нения. Никому не могло прийти в голову, что открытое Броуном движение является проявлением звуковых колебаний очень малой длины волны. В этом отношении, интересно отметить тот факт, что использование пыльцы для регистрации звуковых колебаний было несколько позднее использовано Кундтом, [1]. Кундт заметил, что узлы стоячих звуковых волн можно сделать видимыми при помощи пыли. Он помещал небольшое количество измельчённого песка внутри стеклянной трубки, внутри которой возбуждались звуковые колебания, образовавшие стоячие волны. При этом пыль располагалась в виде периодически повторяющихся сгущений, по которым было можно измерить положение узлов стоячих звуковых волн. Кундт применил методику, которая позволяла отличить колебания в столбе газа внутри трубки от колебаний стенок трубки, см. подробности в [2], №260, стр.64. В сущности, поведение частиц – пыльцы у Броуна и измельчённого песка у Кундта, – имело общую причину – взаимодействие со звуковыми колебаниями среды. Однако эта физическая картина явления была понята далеко не сразу. Решающий шаг в этом направлении был сделан А.Эйнштейном в его теории броуновского движения в начале XX-века.

Эйнштейн рассмотрел формальные волны, которые оказались необходимыми для теоретического анализа броуновского движения. Сегодня об этом принято говорить как о преобразовании Фурье случайного процесса. Несколько позднее, при исследовании проблемы теплоемкости твердых тел, П.Дебай вводит концепцию тепловых волн. На первый взгляд между волнами Эйнштейна и волнами Дебая мало общего. Однако Л.И.Мандельштам усмотрел имеющееся между ними концептуальное родство.

Л.И.Мандельштаму принадлежит смелая идея интерпретировать оба типа волн как акустические волны гигагерцовых частот, $10^9 \div 10^{12}$ Гц, [3], рассматривая их как термодинамические флуктуации плотности и давления, и относя волны Эйнштейна к акустическим возбуждениям в жидкости, а волны Дебая – в твёрдом теле. Скорость звука в конденсированной среде имеет порядок 10^5 cm/sec , поэтому указанные частоты соответствуют длинам волн порядка $10^{-5} \div 10^{-7} \text{ cm}$. Таким образом, среда оказывается неоднородной, пространственный масштаб неоднородностей порядка $0.1 \text{ }\mu\text{m}$ или менее, причём амплитуды неоднородностей малы. Эти соображения были применены Мандельштамом для исследования рассеяния света в конденсированных средах. Неоднородности, порождённые указанными акустическими волнами, можно представить как линзочки, или решётки, на которых рассеивается свет. В этом отношении можно говорить о рассеивании света на звуке. Такое рассеяние и было впервые обнаружено Л.И.Мандельштамом, [3], и носит теперь название рассеяние Мандельштама – Бриллюэна. До сих пор оно является основным инструментом исследования гиперзвука в жидкостях и твёрдых телах, позволяя экспериментально исследовать зависимости скорости и затухания гиперзвука от частоты. Для его теоретического анализа потребовалось построить гидродинамическую теорию звуковых волн гигагерцовых частот с учётом диссипации, то есть, ГГц-обобщение теории Навье–Стокса, [3], [4]. Оказалось, что в этой области частот обычный закон затухания звуковой волны как $\propto \omega^2$ не имеет места, и коэффициент затухания стремится к константе. Затухание гиперзвука в жидкостях весьма велико, так у воды глубина проникновения гиперзвуковой волны порядка нескольких 0.001 cm , см. [5], [6]. Следует иметь в виду, что в области гигагерцовых частот жидкость умеренной вязкости ведёт себя как аморфное твёрдое тело, [7]. В твёрдых кристаллических телах поглощение менее интенсивно. Так, в кварце глубина проникновения порядка 1 cm . В газах гиперзвук практически не распространяется, поскольку длина волны оказывается одного порядка с длиной свободного пробега.

Ввиду большого поглощения гиперзвука в жидкостях его непосредственная регистрация традиционными механическими методами крайне затруднена. По этой

причине в течении длительного времени экспериментаторы ограничивались лишь оптическими экспериментами, основанными на рассеянии Мандельштама-Бриллюэна, которые позволили получить данные о скорости распространения гиперзвука в жидкостях, законе дисперсии и затухании.

Оптические методы применяются также для генерации гиперзвука, [8]. Здесь стоит отметить, что ещё в 1880 году А. Белл наблюдал оптико-акустический эффект – пульсации давления газа при облучении его модулированным потоком инфракрасного излучения. Однако этот эффект давал лишь мало интенсивное акустическое излучение. Появление лазеров в корне изменило положение дел. Существенно, что оптические методы позволили генерировать звук в очень широком диапазоне частот, в гипер-звуковом включительно. При этом следует иметь в виду, что генерация звука сопровождается целым рядом побочных явлений, в том числе тепловым расширением среды, а в случае большой интенсивности лазерного излучения могут происходить фазовые переходы. Получение интенсивного акустического эффекта за счёт мощности лазерного излучения может приводить к нежелательным последствиям для изучаемой среды.

Но оптические методы не являются единственно возможными для генерации гиперзвука. В работе [9], был предложен метод возбуждения и приема гиперзвука за счёт взаимодействия поверхностной электромагнитной волны с пьезоэлектрическим кристаллом. Дальнейшее развитие генерации гиперзвука пошло по линии конструирования акустических аналогов лазеров, так называемых *фазеров*, см. ниже. Была выдвинута идея создания акустического квантового генератора гиперзвука. Towns [10] предложил использовать для этой цели системы парамагнитных центров с инверсной населенностью спиновых уровней. Для конкретной реализации этой идеи решающую роль сыграло использование явления акустического парамагнитного резонанса (АПР), который имеет место при совпадении частоты акустической волны с интервалом между энергетическими уровнями парамагнитного иона в приложенном магнитном поле, [11]. В обычных условиях АПР сопровождается усилением поглощения акустической волны. Передача энергии происходит за счёт спин-фонного взаимодействия: волна гиперзвуковой частоты модулирует внутрикристаллическое поле, а появляющееся при этом электромагнитное поле той же частоты взаимодействует со спином. С другой стороны, при создании инверсии населённости спиновых уровней и достаточно сильной спин-фонной связи происходит усиление акустической волн на частоте АПР. Если усиление превосходит затухание упругих волн в кристалле, наступает самовозбуждение системы, сопровождающееся генерацией когерентных фононов. Таким образом, принцип работы фазера как квантового генератора гиперзвука такой же как и у оптического лазера. В результате был создан, [12], квантовый генератор монохроматических продольных гиперзвуковых колебаний – *фазер* (phonon amplification by stimulated emission of radiation – phaser). Следует отметить, что воплощение этой идеи на практике потребовало значительных усилий, [9], [12].

В последнее время были разработаны источники монохроматического гиперзвука на основе полупроводниковых решеток, фононные лазеры, или SASER'ы, [13] – [18], в которых генерация гиперзвука происходит за счёт взаимодействия электронов с фононами. SASER представляет полупроводниковую сверхрешетку, помещённую в полость со стенками, отражающими фононы. При возбуждении электронов на терагерцовых частотах посредством закачки гиперзвука за счёт электрон-фонного взаимодействия генерируются новые фононы. По мере того как эти фононы взаимодействуют с электронами, находящимися в последовательных квантовых ямах сверхрешётки, они возбуждают следующие порции электронов, и так далее. В результате из полости излучается узкий луч гиперзвука.

Как было упомянуто выше, гиперзвуковые волны сильно поглощаются в жидкостях. Затухание звука принято описывать амплитудным коэффициентом затухания, полагая в

простейшем случае волны, распространяющейся вдоль оси x , амплитуду волны в виде

$$A(\vec{r}, t) = A_0(t) e^{-\alpha x}$$

Размерность α равна cm^{-1} , и обратная величина $\Lambda = 1/\alpha$ имеет смысл глубины проникновения волны, [7], Гл. II. В области гигагерцовых частот распространение звука описывается теорией Мандельштама – Леонтовича, [19], [20]. Их теория даёт в качестве константы диссипации

$$\alpha = \frac{\omega^2 \tau (c_\infty^2 - c_0^2)}{2c_0^3 (1 + \omega^2 \tau^2)}$$

где τ – характерное время релаксации, c_0, c_∞ – скорости звука в областях малых и высоких частот, соответственно. Видно, что в области очень высоких частот зависимость α от частоты ω пропадает и имеет место формул

$$\alpha = \frac{c_\infty^2 - c_0^2}{2c_0^3 \tau}$$

У воды в области частот порядка 0.9 ГГц диссипативная константа α при температуре 25 $^\circ C$ согласно данным работы [6] равна $178 \div 3 \text{ cm}^{-1}$, т.е. глубина проникновения $56 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$. Длина волны гиперзвука равна, соответственно, $0.38 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$. Таким образом, гиперзвук при этих условиях хотя и сильно затухает в воде, но всё же распространяется. Поэтому можно поставить вопрос об его экспериментальном изучении в плёнках толщины порядка нескольких десятков μm .

Теоретические представления касательно структуры жидкости и распространения гиперзвука, [21], позволяют предположить, что наличие дополнительных неоднородностей в виде коллоидных частиц и макромолекул, может приводить к дополнительному поглощению гиперзвука. Для нас существенно, что такое поглощение может быть связано с возбуждением внутренних степеней свободы макромолекул в гигагерцовом диапазоне. В этом отношении, представляет интерес рассмотрение особого случая молекул ДНК.

Взаимодействие звуковой волны с молекулой ДНК может спровоцировать возбуждение фоновых мод молекулы, что приведёт к поглощению гиперзвука растворах ДНК на некоторых резонансных частотах, соответствующих частотам фоновых мод. Существенно, что, как показывают экспериментальные данные, [22]–[24], и теоретические оценки, [25]–[27], частоты фононов ДНК находятся в ГГц-диапазоне, и, следовательно, можно ожидать взаимодействие последних с гиперзвуковыми волнами. Доступность источников гиперзвука, см. [13]–[18], предполагает наличие возможности исследования фоновых ГГц-мод ДНК при помощи гиперзвуковой спектроскопии.

Наличие затухания требует тщательного выбора образцов ДНК для изучения фоновых мод. Сегодня для этих целей в основном используют плёнки, [28], [29]. Возможно, это способствует уменьшению эффектов затухания при распространении гиперзвука в жидкости, а также затухания самих фоновых мод ДНК. Растворы ДНК, видимо, не лучший выбор для подобных опытов, поскольку эффекты затухания значительны в этом случае.

Затухание фоновых мод ДНК тесно связано с проблемой гидратации ДНК. Принято считать, что имеются два процесса релаксации в гидратированной ДНК, связанные с первичной и вторичной гидратной оболочкой со временами релаксации $\tau_1 = 4 \times 10^{-11}$ и $\tau_2 = 2 \times 10^{-12}$ сек. Время пребывания молекулы воды в бороздках молекулы ДНК составляет порядка $0.2 \times 10^{-9} \div 0.4 \times 10^{-9}$ сек, [30]. Фононная динамика имеет характерные времена порядка $10^{-9} \div 10^{-12}$ сек, и необходимо использовать обобщённую гидродинамику в ГГц-диапазоне, [21], чтобы оценить, к примеру, диссипативные силы, действующие на возбуждённую молекулу. Пока эту проблему трудно решить, и имеем

лишь информацию о дисперсии и затухании звуковых волн этого диапазона, необходимое для теоретического описания рассеивания Мандельштама-Бриллюэна.

Для теоретического анализа этих явлений существенно, что сильное затухание одних фононных мод из-за взаимодействия с гидратной оболочкой может вызвать появление других мод. Затухание затрагивает главным образом внешнюю часть двойной спирали и, судя по работе [31], не затрагивает напрямую колебания пар оснований. Следовательно, мы можем предположить, что звуковая волна зацепляет молекулу, вызывая торсионные колебания, и может вызвать колебания пар оснований, соответствующие внутренним колебаниям молекулы.

Динамика молекулы ДНК определяется ещё одним обстоятельством, которое может приводить к очень своеобразным эффектам. Дело в том, что винтовая симметрия ДНК носит лишь приближённый характер, поскольку последовательность пар оснований хаотична. В результате углы, определяющие конформацию двойной спирали, и упругие константы тоже образуют неупорядоченную последовательность, см. обзор [32]. Но возбуждения в неупорядоченных средах имеют, как впервые было выяснено И.М.Лифшицем, [33] – [37], ряд существенных особенностей.

2. Возбуждения в неупорядоченных средах

Неупорядоченные среды характеризуются отсутствием трансляционной инвариантности. Это обстоятельство не исключает наличия в них упругих колебаний с некоторыми определёнными частотами ω . Отсутствие трансляционной инвариантности приводит к тому, что закон дисперсии $\omega(k)$ не имеет места, поскольку волновой вектор k не определён в силу отсутствия однородности среды, для описания динамических процессов в неупорядоченных средах требуются методы, отличающиеся от применяемых в теории идеальных кристаллов. Тем не менее, концепцию плотности состояний всё же можно перенести и на случай неупорядоченных сред, [38], [39]. Основной характеристикой при этом оказывается *плотность фононных состояний* $g(\omega)$, посредством которой число фононных состояний в интервале $(\omega, \omega + d\omega)$ определяется как $g(\omega)d\omega$. Часто бывает удобно рассмотреть характеристику плотности фононных состояний, задаваемую как функция квадрата частоты, т.е. как плотность $G(\omega^2)$ относительного числа частот в интервале $(\omega^2, \omega^2 + d\omega^2)$. Имеет место соотношение $g(\omega) = 2\omega G(\omega^2)$. Функция $g(\omega)$ является важнейшей характеристикой динамики системы. Её поведение для неупорядоченных сред существенно отличается от случая упорядоченных решеток, как это проиллюстрировано на рис.1.

Задача исследования влияния дефектов на фононные состояния среды впервые была поставлена и решена И.М. Лифшицем, [35], для случая дефекта кристаллической решётки, порождённого атомом изотопа [39]. Особенностью динамики неупорядоченных сред является наличие локализации упругих колебаний, то есть наличие динамических возбуждений, содержащихся в фиксированной ограниченной области и практически не выходящих за её пределы. Это верно как для упругих возбуждений, фононов, так и для электронных состояний.

Подобные явления хорошо известны и в упорядоченных средах, например, бризер-моды в кристаллах, однако для описания последних используют нелинейные модели динамики. В неупорядоченных средах они появляются и в *рамках линейного приближения*, за счёт отсутствия трансляционной инвариантности. Например, они имеются в решётках, содержащих дефекты (изотопы атомов решётки массы отличной от массы регулярной решётки). Именно для этого класса систем явление локализации было впервые исследовано И.М.Лифшицем, [35]. В последующих работах И.М.Лифшица и его сотрудников явление локализации было распространено на более широкий класс систем с особенностями и дефектами, [33]–[37]. Методы теории Лифшица применялись

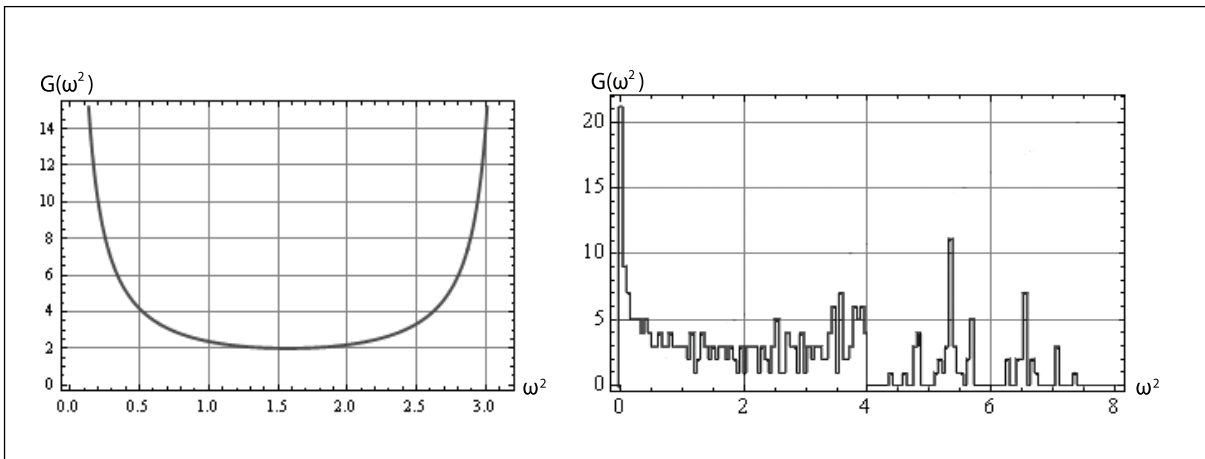


Рис. 1. Функция распределения квадратов собственных частот $G(\omega^2)$ гармонической цепочки при наличии трансляционной инвариантности (слева) и при отсутствии последней (справа).

также к проблемам исследования возбуждений поверхностных и маломерных систем, см. [40]–[43] и имеющиеся там ссылки.

Локализация фононных возбуждений встречается достаточно часто, хотя и не является обязательной. Непосредственное наблюдение локализации затруднено и о её наличии судят по косвенным признакам, исходя из теоретических соображений. Тем не менее, концепция локализации играет доминирующую роль в теории процессов переноса в неупорядоченных средах, например, проводимости, [44], где её принято называть андерсоновской локализацией, [45].

Вычисление плотности фононных состояний $g(\omega)$ может быть осуществлено аналитически лишь в простых случаях. В этом отношении, наибольший интерес представляет исследование резонанса локализованной моды, соответствующей дефекту – изотопу примесного атома, см. [46] и имеющиеся там ссылки. То, что изменение массы примесного атома может привести к деформации спектра упругих колебаний, известно ещё со времен работ Рэлея, [47]. Существенно, что в случае легкой примеси возникает локализованная мода, частота которой может выйти за пределы непрерывного спектра, [35], [46]. Качественно это обстоятельство можно понять так, что лёгкий атом может колебаться сам по себе, не возмущая окружающую среду. Подробный анализ, [46], показывает, что частота локальной моды, Ω , удовлетворяет соотношению

$$\frac{\delta M}{M} \Omega^2 \int \frac{g(\omega) d\omega}{\omega^2 - \Omega^2} = 3N$$

где $g(\omega)$ – плотность фононных состояний, N – число частиц в кристалле, δM – дефект массы изотопа. В случае непрерывной зависимости $g(\omega)$, которая имеет место для реального кристалла, локализованная мода имеется только для конечных значений дефекта массы δM , то есть имеет место пороговый эффект. Указанные соображения относятся к акустическим фононам. Аналогичные рассуждения можно провести и в случае оптических фононов, что имеет интерес для анализа экспериментальных данных. При этом оказывается, что в случае тяжёлой примеси имеется локальная мода, которая находится ниже оптической полосы, [46].

Стоит отметить, что основные физические выводы о характере локализованных мод (их появление за счёт отщепления от спектра невозмущенных колебаний, роль тяжёлых и лёгких примесей) сохраняются и в случае общей теории, которая применима в очень широком диапазоне физических систем, см. [33].

Для исследования фононных спектров неупорядоченной решетки применялся асимптотический метод моментов, [39], что позволило в ряде случаев получить качественную информацию о характере распределения фононных частот. Как указал *P. Dean*, [48], имеется препятствие к применению метода моментов, вызванное характером плотности фононов неупорядоченных решеток. Метод моментов основывается на аппроксимации спектра полиномами, т.е. предполагается, что спектр является достаточно гладкой функцией. В действительности спектр очень плохо аппроксимируется полиномами, как это следует из результатов численного анализа, проведенного *Dean*'ом. При этом, адекватное аналитическое описание тонкой структуры, найденной *Dean*'ом отсутствует.

Стоит отметить, что во многих работах локализованные моды рассматриваются как явления нелинейной динамики, то есть в рамках аналитической теории солитонов. Своеобразие теории Лифшица состоит в том, что она основывается на сугубо линейных соображениях, что позволяет предположить возможную продуктивность общетопологического подхода. Интересно, что математический контекст этой теории близок к общей топологии. В частности, описание тонкой структуры функции плотности фононных состояний не удаётся дать в терминах гладких функций. Вместе с тем, при увеличении числа узлов цепочки, по-видимому, можно рассмотреть предельный асимптотический переход, который позволит применять методы общей топологии. Отметим, что при исследовании хаотических систем. Возникают объекты, например, странные аттракторы, которые для своего описания требуют введения конструкций, типа канторовского совершенного множества.

Для экспериментального исследования спектров неупорядоченных сред применялось неупругое рассеяние нейтронов, см. [38]. Исследовались, в частности, колебания неупорядоченных кристаллов $Cu_{1-x}Au_x$, [49], и $Cr_{1-x}W_x$, [50]. В работе [51] изучались фононы в кристалле KBr при замещении одного из ионов калия ионом лития (ион лития легче иона калия). Как и следовало ожидать из теории, было зарегистрировано появление локализованной моды за счёт дефекта массы изотопа, причём изменение потенциала межатомного взаимодействия примесного атома с решёткой, по-видимому, мало (порядка 0.6% основного взаимодействия, [46]). Собственно, решить была ли зарегистрированная мода локализованной, или нет, можно лишь по косвенному признаку – форме спектра и расположению спектральной линии. Согласно теоретическим расчётам мода должна была быть локализованной.

Численное моделирование позволяет заглянуть во внутренний мир динамики среды, воспользовавшись данными касательно движения отдельных частиц, а затем сделать выводы о возможных свойствах реальной среды. Для случая решеток, соответствующая методика была разработана в серии работ *Dean*'а, [39], [48], [52]. Им были описаны эффективные и точные алгоритмы вычисления спектров колебаний решеток, которые позволили ему с помощью компьютеров конца 50-х годов прошлого века получить данные о спектральной плотности колебаний $G(\omega^2)$, а также определить и саму форму последних, см. [39] стр. 268–272. Характерной чертой спектров, найденных *Dean*'ом, является наличие тонкой структуры в области высоких частот. Им также были получены нормальные колебания одномерных решёток, отражающие локализацию упругих мод.

Концепция локализации упругих мод в неупорядоченных средах нашла применение во многих областях физики конденсированных сред, [44]. Естественно попробовать применить её и в физике мягкой материи. В этом отношении, большой интерес представляют молекулы ДНК. Действительно, молекула ДНК является макромолекулой и по своим размерам и упругим свойствам подходит как предмет исследования физики колебаний. В то же время, ввиду неупорядоченности последовательности пар

оснований в обычных условиях, она является типичной неупорядоченной средой; в следствие этого привычная винтовая симметрия двойной спирали является лишь приближённой. Для того, чтобы прояснить эту ситуацию вспомним некоторые основные свойства молекулы ДНК.

3. Упругие моды молекулы ДНК.

Напомним, что молекула ДНК является двойной спиралью, образованной двумя цепями, состоящими из чередующихся сахаров и фосфатов. Цепи, в свою очередь, имеют форму обвивающихся спиралей, связанных посредством пар оснований. В целом вся конструкция похожа на винтовую лестницу. Основаниями являются: аденин (А), тимин (Т), гуанин (Г), цитозин (Ц). Они могут объединяться в пары по правилу: А – Т, Г – Ц (это правило называют *комплементарностью*). Спаривание происходит благодаря образованию водородных связей: 2-х для пары А – Т и 3-х для пары Г – Ц (см. рис. 2).

Таким образом, энергия спаривания Г – Ц больше чем энергия А – Т. Расположение пар допускает вариации, которые могут достигать 10 - 20 %, (по поводу структуры ДНК см. обзор [32]). Таким образом, винтовая симметрия ДНК имеет место только приближённо. Более того, учитывая неупорядоченность последовательность пар оснований, можно представлять себе эту молекулу как неупорядоченную среду. Диаметр двойной спирали ДНК равен приблизительно 20 Å, а её длина может достигать нескольких миллионов Å, и более. Существенной особенностью является её жесткость, то есть упругие константы ДНК, рассматриваемой как макроскопическое образование, таковы, что молекулы длины, не большей чем так называемая длина персистентности, L_{per} , образуют прямолинейные отрезки, устойчивые по отношению к тепловым флуктуациям. Для ДНК L_{per} порядка 500 Å¹. Можно оценить характерные частоты упругих мод ДНК. Скорость звука в ДНК, как во всех конденсированных средах², порядка 10⁵ cm / sec. Если рассматривать возбуждения с характерной длиной порядка длины персистентности, $L_{per} \sim 5 \cdot 10^{-6}$ Å, и не меньше десятка Å, то получаем характерные частоты порядка $\sim 10^9 - 10^{12}$ Гц, то есть в гиперзвуковой области. Это обстоятельство является решающим для всего дальнейшего рассуждения. Действительно, отсюда следует, что воздействия на молекулу ДНК, будь то тепловые флуктуации или внешние поля, соответствующие области ГГц-диапазона, являются наиболее вероятными агентами возникновения дефектов в ДНК. В частности, воздействие тепловых колебаний на молекулу лежит именно в этой области. Чтобы убедиться в этом, достаточно заметить, что движение броуновских частиц, которое является следствием тепловых флуктуаций, происходит, как это впервые отметил Л.И.Мандельштам, под влиянием волн гиперзвука. Тепловые флуктуации в жидкости, то есть волны гиперзвука, могут сравнительно легко рвать водородные связи, соединяющие пары оснований, поскольку соответствующая энергия связей невелика: порядка $3 k_B T$, см. [53].

Молекула ДНК имеет необычные упругие свойства вследствие наличия винтовой симметрии и отсутствия упорядоченности последовательности пар оснований: с физической точки зрения (пренебрегая генетической ценностью), эта последовательность выглядит достаточно случайно.

Колебания в ДНК имеют важное значения для понимания биологических процессов в клетке, см. [25, 54]. Характерную особенность её динамики составляют локализо-

¹В зависимости от ионного состава раствора, в котором находится молекула, L_{per} может принимать значения от 300 до 1000 Å, см. V.A. Bloomfield, "DNA condensation", *Curr.Opin.Struct.Biol.*, **6**, (1996), 334-341.

²экспериментальные данные не очень хорошо согласованы, но этой грубой оценке не противоречат.

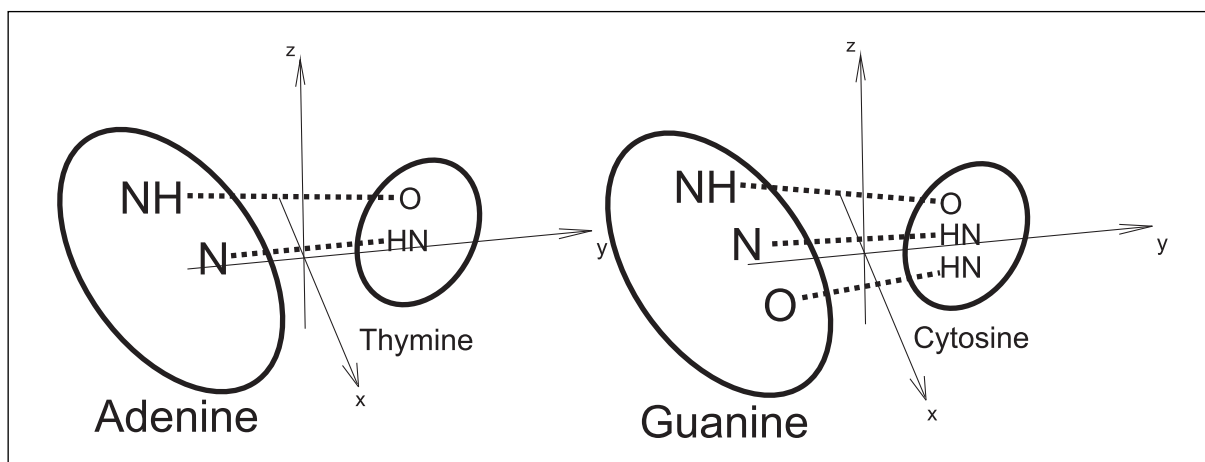


Рис. 2. Пары оснований ДНК: аденин – тимин и гуанин – цитозин. Пунктиром обозначены водородные связи.

ванные возбуждения двойной спирали, которые захватывают лишь несколько десятков пар оснований. Их существование было подтверждено экспериментами по Рамановскому рассеиванию, [22, 23, 28, 55], по поглощению в инфракрасном диапазоне [56, 57], и по рассеиванию Мандельштама-Бриллюэна [24]. В работе [58] фононные моды были изучены с использованием поглощения субмиллиметровых волн в промежутке $\sim 0.01\text{--}10$ ТГц. Так, Woolard et al, [58], нашли многочисленные диэлектрические резонансы в длинноволновом отрезке $\sim 1\text{--}30\text{ cm}^{-1}$, которые они приписывают фононным модам ДНК. Эти результаты обеспечивают новые методы биодиагностики, см. [59].

Как уже было упомянуто выше, упругие моды ДНК изучались в целом ряде работ. Так, *Powell et al.*, [57] отметили, что спектр $\text{poly(dA)} \cdot \text{poly(dT)}$ ДНК уникален тем, что в подходящем растворе имеются чёткие пики около 63, 83, 100 и 110 cm^{-1} при комнатной температуре. Авторам также удалось получить картину спектра для волновых чисел $125\text{--}250\text{ cm}^{-1}$.

До инфракрасной (far-infrared) спектроскопии, *Urabe* и *Tominaga*, [55], опубликовали результаты по низкочастотному рамановскому рассеянию нуклеиновых кислот, включающее наблюдение пика около 85 cm^{-1} . В работе [22] с помощью Раман-спектроскопии ими были изучены гели ДНК в диапазоне температур от 0 до -140°C . Ими замечено наличием коллективной моды ДНК и гидратной её оболочки.

В работе [23] рассмотрены дегидрированные волокна натриевой соли ДНК двух видов: $\text{poly(dA)} \cdot \text{poly(dT)}$ и ДНК теленка. Для первого образца авторы получают выделенные моды и говорят о корреляции раман-активных мод $58\text{--}60$, 78 и $92\text{--}94\text{ cm}^{-1}$ и инфракрасных мод 62 , 80 , 95 cm^{-1} . Однако результаты рамановского рассеяния оказались существенно различными для двух рассмотренных типов образцов. Авторы объясняют подобное различие *уникальностью $\text{poly(dA)} \cdot \text{poly(dT)}$ -ДНК*: эту структуру отличает большая прочность, большая энергия стэкинг-взаимодействий и отсутствие перехода между А и Б формами при изменении ионного состава раствора.

Таким образом, экспериментальные данные указывают, что спектр мод ДНК очень богат и разнообразен. Но особенно важен тот факт, что спектр неупорядоченной ДНК существенно отличается от регулярных $\text{poly(dA)} \cdot \text{poly(dT)}$ и $\text{poly(dG)} \cdot \text{poly(dC)}$. При этом, изучение неупорядоченных ДНК представляет большой интерес, хотя этот класс объектов более сложен. В частности, непонятно, что конкретно искать в эксперименте, чтобы получить не свойство лишь выбранного образца, а какую-то общую характеристику.

Ввиду сложности молекулы ДНК для теоретического исследования упругих мод необходимо применение модельных представлений. Даже сильно упрощённые модели, указывают, что имеются десятки различных мод, [60], [61]. Но, как можно извлечь уже из первых работ по структуре упругих мод ДНК, [62], имеется два основных типа: моды стержня ДНК как целого и межнитевые моды. Последние соответствуют движению сахаро-фосфатных остовов и пар оснований ДНК друг относительно друга. Все эти моды находятся в области гиперзвуковых частот. Можно ожидать, что для их исследования было бы целесообразно применить методику акустической спектроскопии в гиперзвуковом диапазоне. Примечательно, что соответствующие лабораторные возможности имеются.

Модель ДНК как упругого стержня имеет ряд преимуществ, в основном связанных с её сравнительной простотой. Однако, она очень далека от ДНК в реальной жизни, и не учитывает, в частности, двухнитевую структуру ДНК и её винтовую симметрию. А между тем эти два обстоятельства очень существенно влияют на структуру спектра упругих мод молекулы ДНК. Так, в работах [62], [63], методами молекулярной динамики была получена информация об упругих модах ДНК, из которой в частности следует, что структура спектра ДНК очень сильно отличается от структуры упругих мод упругого стержня. Позже, использование крупнозернистых моделей позволило получить данные о спектре упругих мод ДНК, которые также указывают на отличие от спектров модели ДНК как упругого стержня, [60], [61], [64].

Теоретическое изучение фононных мод ДНК выявило упругие колебания двойной спирали, которые являются следствием винтовой симметрии, и её упругой неоднородности [26], [27]. Важно отметить, что фононные моды ДНК могут быть сильно затухающими из-за воздействия с окружающей средой. Этот эффект может быть уменьшен, в некотором смысле, за счёт приготовления образцов определённого типа. Так, фононные моды, возникающие в плёнках, приготовленных из молекул ДНК, повидимому менее подвержены затуханию.

Выводы о степени затухания упругих мод молекулы ДНК обычно основываются на применении модели гидродинамики Навье–Стокса для описания жидкости, в которую погружена молекула. Но следует иметь в виду, что характерный размер при этом определяется диаметром молекулы, т.е. несколько десятков ангстрем, а характерные времена соответствуют частотам гигагерцевого диапазона. Правомочность применимости гидродинамики Навье–Стокса в этих условиях представляется сомнительной. Известно, что в случае рассеяния света Мандельштама–Бриллюэна при сходных размерах и временах гидродинамика Навье–Стокса не корректна, и следует применять теорию Леонтовича–Мандельштама, [7]. Отметим также, что *Zandt* и *Saxena* показали, что фононные моды ДНК слабо затухают согласно релаксационной гидродинамики Максвелла, [65]. Так что, в том что касается теории, вопрос о релаксации упругих мод молекулы ДНК к настоящему моменту далёк от своего окончательного решения.

4. Модель, учитывающая конформацию молекулы ДНК

В работе [66], следуя идеям известной работы *H.Cappellmann* и *W.Biem*, [67], была предложена модель молекулы ДНК, которая позволяет качественно учесть характер спектра её упругих мод. А именно, учитывается, что молекула ДНК характеризуется, [68], требованиями:

- ДНК состоит из двух нитей;
- пары оснований связаны водородными связями;
- геликоидальная симметрия.

В основе модели работы [66] лежит представление молекулы ДНК как одномерной решётки, оснащенной векторным полем, которое позволяет качественно учесть

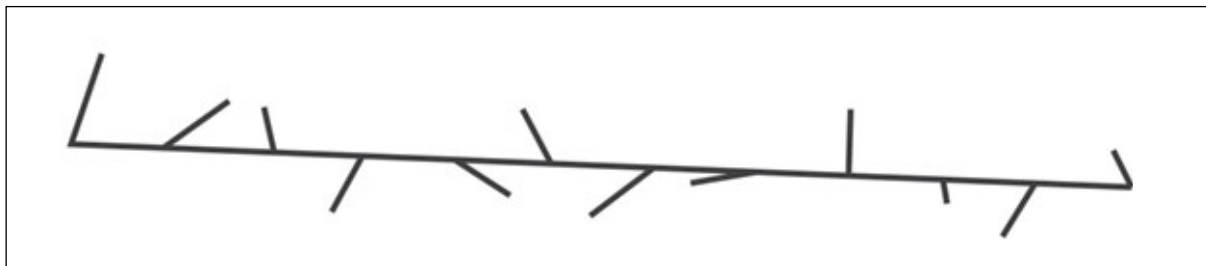


Рис. 3. Решётка из векторов $\vec{Y}_n$ относительного положения оснований в паре.

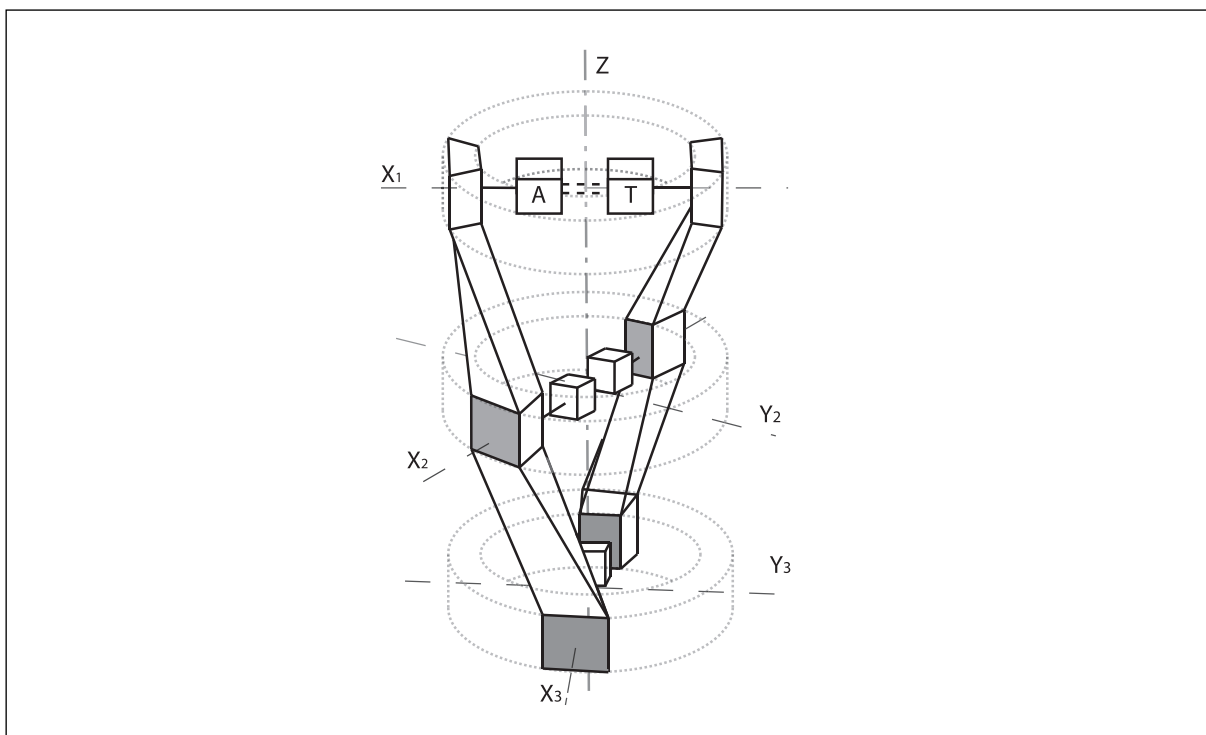


Рис. 4. Модель ДНК: введение локальных систем координат для каждой пары комплементарных оснований. Переменные $\vec{Y}_i$ соответствуют относительному смещению пар оснований (кубиков у оси спирали) при неподвижных остовах молекулы, в то время как φ_i отвечает повороту i -го пунктирного кольца вместе с остовом и парой оснований в этом сайте молекулы.

приведённые выше требования. Узлы решётки соответствуют парам оснований, вектора, приложенные к узлам решётки – смещению пар оснований друг относительно друга, см. рисунок 3.

Мы можем рассматривать ДНК как две нити, представляющие собой нуклеотидные последовательности, как показано на рисунке 4. Имеется внутренняя степень свободы, связанная со смещением оснований относительно друг друга в паре оснований, [69], см. рисунки 5, 6.

К настоящему моменту нет общепринятых оценок величин смещения, поэтому нам придётся довольствоваться лишь качественной картиной внутреннего. Таким образом, в ДНК также есть внутренние степени свободы, обусловленные относительным смещением внутри пар оснований. С другой стороны, нити также могут смещаться, вращаясь относительно оси двойной спирали. Стоит заметить также, что относительные *положения равновесия* двух соседних пар оснований связаны углом поворота Ω , равным $2\pi/2$ для Б-формы ДНК.

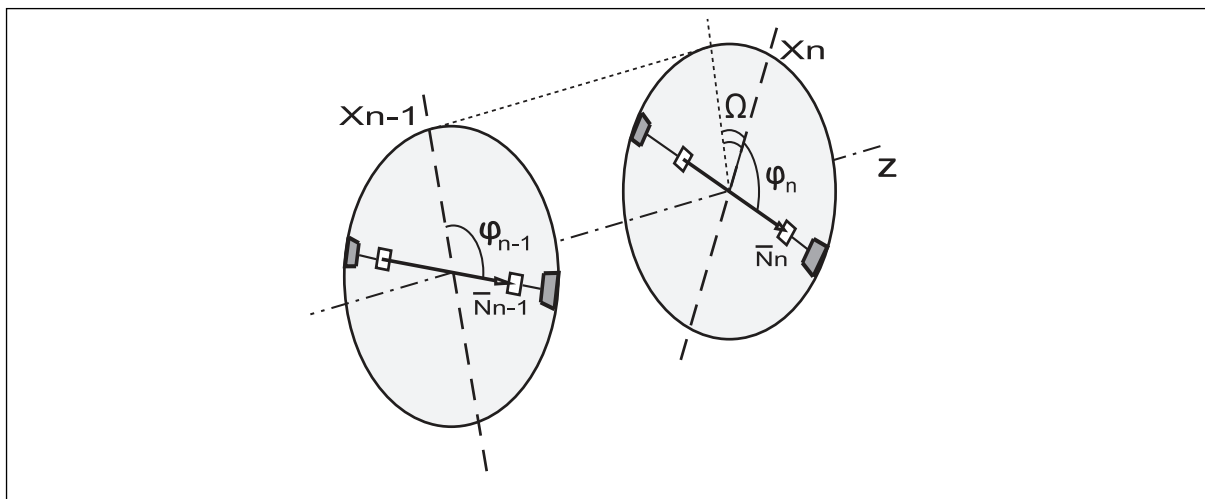


Рис. 5. Углы φ_n обозначают отклонение от равновесия. Угол $\Omega = \pi / 5$ обозначает закрутку двойной спирали.

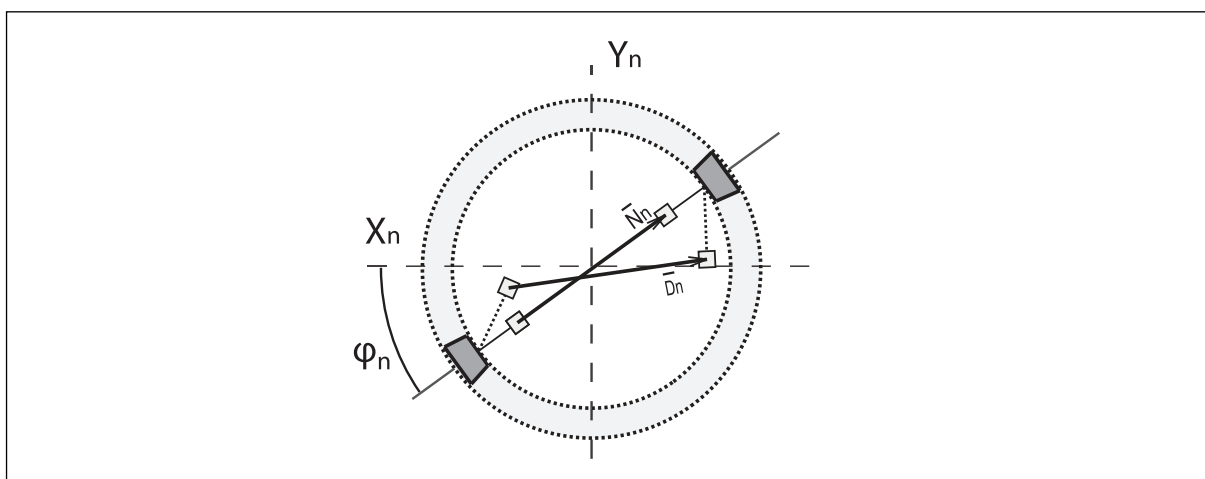


Рис. 6. Углы φ_n обозначают отклонение от равновесия. Векторы $\vec{N}_n$ и $\vec{D}_n$ обозначают невозмущённое и возмущённое положения пары оснований. Вектор $\vec{Y}_n$ равен разности $\vec{D}_n$ и $\vec{N}_n$, что $\vec{Y}_n = \vec{D}_n - \vec{N}_n$.

Чтобы придать такому представлению более количественную форму мы допустим некоторые упрощения. Для этого мы перейдём от реалистичной картины 4 к более абстрактной 5 и 6, предполагая молекулу ДНК одномерной решёткой, узлы и связи которой соответствуют сахарам и фосфатным группам. Мы пренебрегаем степенями свободы, связанными с изгибом молекулы, потому как считаем отрезки молекулы ДНК достаточно короткими, соответствующей персистентной длине (порядка $500 \text{ \AA}$). Таким образом, мы полагаем молекулу достаточно короткой, чтобы считать её линейной, но при этом достаточно длинной, чтобы рассматривать колебания пар оснований.

Мы учитываем внутренние движения молекулы, рассматривая векторы $\vec{Y}_n$ в каждом узле решётки. Вектор $\vec{Y}_n$ описывает относительное смещение базиса, как показано на рисунке 6, и равен нулю, если пара оснований находится в правильном положении относительно соседних пар, как показано на рисунке 4. Получаем картину одномерной решётки, оснащённой векторами $\vec{Y}_n$ в каждом узле, см. рис. 5. Чтобы облегчить задачу мы предположим векторы $\vec{Y}_n$ перпендикулярными оси спирали. Мы также обозначим локальную закрутку двойной спирали, приходящуюся на n-й узел через φ_n .

Используя введённые выше обозначения мы можем окончательно сформулировать модель и написать уравнения движения для нашей системы. Ситуация похожа на уравнения Кирхгофа [70], [71], для равновесия одномерного стержня в случае когда длина стержня играет роль времени. Предположим, что пары азотистых оснований плоские и лежат в параллельных плоскостях, перпендикулярных оси молекулы. Вообще говоря, в реальной ДНК есть отклонения от плоского положения, см. [32], но имея ввиду качественное описание динамики ДНК мы пренебрежём подобными эффектами. Для заданной пары мы выбираем индивидуальную систему координат с началом отсчёта в точке пересечения оси спирали и плоскости пары. Оси таких локальных систем координат выбираются так, что ось ζ параллельна оси двойной спирали, а направление оси ξ совпадает с направлением положением равновесия заданной пары оснований. Третья ось θ перпендикулярна первым двум осям. Таким образом, мы получаем локальную систему координат, или базис, для каждой пары оснований. Оси координат следующей пары оснований получаются из предыдущей поворотом на угол Φ , равный в положении равновесия

$$\Omega = 2\pi / 10$$

что и есть закрутка двойной спирали, в то время как деформация структуры получается в результате малых отклонений ϕ_n в узлах, $n = 1, 2, \dots$, так что угол поворота пары оснований относительно предыдущей оказывается равным

$$\Phi = \Omega + \phi_{n+1} - \phi_n \quad (1)$$

Теперь мы можем выразить растяжения, вызванные деформациями введёнными выше, следуя общей схеме, см. [71], ч.2, §§17–19. Напряжение u_{nn+1} возникающее из-за вращательного отклонения пар оснований в узлах $n, n+1$ задаётся равенством

$$u_{nn+1} = \frac{1}{a} [R^{-1}(\Phi) \vec{Y}_{n+1} - \vec{Y}_n]$$

здесь $R(\Phi)$ – матрица поворота вокруг оси двойной спирали на угол Φ , a – расстояние между соседними парами оснований. Энергия растяжения, вызванная смещением пар оснований внутри пары оснований, $\vec{Y}$ задаётся

$$\frac{1}{2} \varepsilon_n \vec{Y}^2$$

Натяжение v_{nn+1} вызванное смещением сахаро-фосфатных нитей задаётся углами ϕ_n и равны

$$v_{nn+1} = \frac{\tau_n}{a} [\phi_{n+1} - \phi_n]$$

Соответствующие энергии равна

$$\sigma_{nn+1} = \frac{k_n}{a} [R^{-1}(\Phi) \vec{Y}_{n+1} - \vec{Y}_n]^2 \quad \text{или} \quad \omega_{nn+1} = \frac{\tau_n}{a} [\phi_{n+1} - \phi_n]^2$$

соответственно. Здесь k_n и τ_n – константы жёсткости. Таким образом, мы имеем следующее выражение для потенциальной энергии

$$U = \sum_n \left\{ \frac{\tau_n}{2a^2} [\phi_{n+1} - \phi_n]^2 + \frac{k_n}{2a^2} [R^{-1}(\Phi) \vec{Y}_{n+1} - \vec{Y}_n]^2 + \frac{\varepsilon_n}{2} \vec{Y}^2 \right\} \quad (2)$$

Запишем, далее, кинетическую энергию. Она состоит из двух частей:

(1) энергия вращения сахаро-фосфатного остова

Запишем, далее, кинетическую энергию. Она состоит из двух частей:

(1) энергия вращения сахаро-фосфатного остова

$$T_{str} = \sum_n \frac{I_n}{2} \dot{\phi}_n^2 \quad (3)$$

где I_n – моменты инерции n -й пары нуклеотидов и

(2) энергия движения пар оснований

$$T_{bases} = \sum_n \frac{M_n}{2} \dot{Y}_n^2 \quad (4)$$

где M_n – эффективная масса n -й пары оснований. В суммах выше n – номер, соответствующий n -й паре оснований, и $n = 1, 2, \dots, N$, N – число пар оснований в рассматриваемом отрезке ДНК.

Так, полная энергия представляется суммой

$$H = T_{str} + T_{bases} + U$$

Из (2) – (3) следуют уравнения движения.

Таким образом, мы получили модель, которая обеспечивает качественное описание динамики молекулы ДНК. Её можно представить как $(1 + \varepsilon)$ -мерную модель, в том смысле, что с формальной точки зрения она одномерная, хотя, в то же время, она включает динамику пар оснований в двух перпендикулярных измерениях вне оси спирали. Это осуществляется благодаря $\vec{Y}_n$, направленного трансверсально оси молекулы, а то время как скалярные углы ϕ_n описывают закрутку сахаро-фосфатного остова.

Перепишем переменные модели в комплексной форме. Введём комплексные величины z_n

$$\vec{Y}_n = (Y_n^1; Y_n^2) \rightarrow z_n = Y_n^1 + iY_n^2$$

тогда выражения для энергии $E = T + U$, перепишутся в виде

$$T = \sum_{n=0}^N \frac{I_n \dot{\phi}_n^2}{2} + \sum_{n=0}^N \frac{m_n \dot{z}_n \dot{z}_n^*}{2},$$

для кинетической энергии и

$$U = \sum_{n=0}^N \frac{\varepsilon_n z_n z_n^*}{2} + \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\tau_n}{2a^2} |\phi_{n+1} - \phi_n|^2 + \sum_{n=0}^{N-1} \frac{k_n}{2a^2} \left| z_{n+1} - e^{i(\Omega + \phi_{n+1} - \phi_n)} z_n \right|^2.$$

для потенциальной. Производя замену

$$z_n = e^{in\Omega} y_n$$

имеем

$$T = \sum_{n=0}^N \frac{I_n \dot{\phi}_n^2}{2} + \sum_{n=0}^N \frac{m_n \dot{y}_n \dot{y}_n^*}{2},$$

и

$$U = \sum_{n=0}^N \frac{\varepsilon_n y_n y_n^*}{2} + \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\tau_n}{2a^2} |\phi_{n+1} - \phi_n|^2 + \sum_{n=0}^{N-1} \frac{k_n}{2a^2} \left| y_{n+1} - e^{i(\phi_{n+1} - \phi_n)} y_n \right|^2.$$

Рассматривая лишь малые отклонения от равновесия и предполагая разности $(\phi_{n+1} - \phi_n)$ малыми, имеем

$$e^{i(\phi_{n+1} - \phi_n)} = 1 + i(\phi_{n+1} - \phi_n) + O((\phi_{n+1} - \phi_n)^2).$$

пренебрегая членами второго порядка по ϕ .

В рассматриваемом приближении уравнения движения имеют вид

$$\begin{aligned} a^2 I_n \ddot{\phi}_n &= \tau_{n-1} \phi_{n-1} - (\tau_{n-1} + \tau_n) \phi_n + \tau_n \phi_{n+1} \\ &- k_n (a_n b_{n+1} - a_{n+1} b_n) + k_{n-1} (a_{n-1} b_n - a_n b_{n-1}), \end{aligned} \quad (5)$$

$$a^2 m_n \ddot{a}_n = -a^2 \varepsilon_n a_n + k_{n-1} a_{n-1} - (k_{n-1} + k_n) a_n + k_n a_{n+1} + k_n (\varphi_{n+1} - \varphi_n) b_{n+1} - k_{n-1} (\varphi_n - \varphi_{n-1}) b_{n-1}, \quad (6)$$

$$a^2 m_n \ddot{b}_n = -a^2 \varepsilon_n b_n + k_{n-1} b_{n-1} - (k_{n-1} + k_n) b_n + k_n b_{n+1} - k_n (\varphi_{n+1} - \varphi_n) a_{n+1} + k_{n-1} (\varphi_n - \varphi_{n-1}) a_{n-1}. \quad (7)$$

a_n и b_n обозначают вещественную и мнимую части y_n соответственно.

Поскольку реальная молекула ДНК не идеальная спираль, константы $M_n, I_n, k_n, \varepsilon_n$, вообще говоря, образуют случайную последовательность. В связи с этим, конформационные параметры молекулы изменяются образом, на десятки процентов, вместе с последовательностью пар оснований по сравнению с идеальной двойной спиралью, [32].

5. Моделирование гиперзвуковой динамики ДНК

Для численного моделирования мы выберем собственные единицы длины, массы и времени, которые характерны для структуры и динамики ДНК. Примем следующие ДНК-единицы:

- $M = 10^{-22} gr$ в качестве единицы массы, по порядку величины близкой к массе пары оснований;
- $L = 3 \times 10^{-8} cm$ как единица длины, близкая к расстоянию между соседними парами;
- $T = 10^{-13} sec$ в качестве единицы времени, соответствующей верхней границе фононов в ДНК.

Мы можем получить оценки констант нашей модели следующим образом. Для скорости звука, c , в молекуле ДНК имеем порядок $10^5 cm/sec$, [28], [29]. Во введенных выше единицах $c \sim 0.3$. Для моментов инерции I_n пары оснований, равного по порядку величин $m_n R^2$, где R – радиус молекулы ДНК, равный ~ 10 Å. Значит, $I_n \sim 10$ в единицах ДНК. Чтобы получить оценки констант $k_n, \tau_n, \varepsilon_n$ следует вспомнить, что значения скорости звука, c , и частот ω колебаний пар оснований, имеют порядок $c = 0.3$ и 1 соответственно. Поскольку $k_n/m_n \sim c^2$ и $\tau_n/I_n \sim c^2$, имеем $k_n \sim 0.1$ и $\tau \sim 1$, соответственно. Для частот колебаний имеем $\varepsilon_n/m_n \sim 1$, если мы предположим, что это будет по порядку 1 ГГц. Для коэффициента вязкости воды имеем $\mu \approx 0.3$. Подводя итог имеем следующие оценки параметров в единицах ДНК

$$c \sim 0.3, \quad I_n \sim 10, \quad k_n \sim 0.1, \quad \tau_n \sim 1, \quad \varepsilon \sim 1, \quad \mu \sim 0.3$$

Приведённые выше оценки лежат в основе численных значений параметров моделирования.

Как было отмечено выше, гидродинамическая теория сегодня не обеспечивает надёжного теоретического аппарата для исследования взаимодействий между молекулой и раствором. Поскольку нас интересует только качественное описание динамики системы, предположим, что вязкая сила, действующая на n -ю пару нуклеотидов молекулы имеет

$$d_n = -\gamma \dot{\varphi}_n \quad (8)$$

где γ – параметр диссипации. Величину этого параметра сложно оценить. Оценки, предлагаемые на основе картины Навье-Стокса, по-видимому, далеки от реальности по причине малых времён, а также структуры водной оболочки молекулы (см. [24]). Соображения размерности и оценки по порядку величин дают для момента, вызываемого вязкостью в узле n , значение

$$\frac{\gamma}{a^2} \propto \mu R^3 \quad \text{или} \quad \gamma \propto \mu a^2 R^3$$

В ДНК-единицах имеем $\mu \approx 0.3$, $a = 1$, $R \approx 3$, что означает, что $\gamma \approx 10$.

При выборе силы, с которой звуковая волна действует на молекулу мы должны учесть тот факт, что длина волны гиперзвука гигагерцовой частоты на несколько порядков больше отрезка молекулы. Последняя составляет пару сотен Å, сила зависит только от времени. Предположим также, что закрутка молекулы, вызываемая этой силой мала и примем вид этого воздействия в виде

$$f = A\varphi_n \cos(\omega t) \quad (9)$$

Как было указано выше, соображения основанные на уравнениях Навье–Стокса, [72], не могут привести к осмысленному результату. Но, тем не менее, суб-ТГц фононные моды в ДНК наблюдаются, см. [58]. Противоречие теории и эксперимента, повидимому, вызвано использованием обычной гидродинамики в области, в которой она может давать неправильный результат. В частности, из неё следуют оценки коэффициентов A и γ в уравнениях (5)–(7), которые также противоречат существованию фононных мод. Следовательно, мы полагаем, что оценки A и γ должны находиться в других пределах, чем нам предсказывает гидродинамика Навье–Стокса. Численное моделирование позволяет получить некоторые указания касательно их истинного значения.

6. Моделирование возбуждения межнитевых мод накачкой гиперзвука

Дополним уравнения движения (5) силами вязкости и внешнего возбуждения (8), (9), Эти уравнения нелинейные и требуют численного решения для изучения. При их интегрировании использовались алгоритмы *Verlet*, *LeapFrog*, а также явный и неявный *Adams*. Производились систематические проверки результатов, получаемых разными алгоритмами, с целью избежания ошибок при вычислениях. Шаг интегрирования брался от 0.01 до 0.001 периодов колебаний внешнего воздействия, в зависимости от длительности вычислений.

Предложенные выше уравнения движения с учётом накачки и диссипации предполагают, что мода φ -моду передаёт энергию в a_n - и b_n -моды, согласно уравнениям (6) и (7). Поскольку эти моды наблюдаются, мы получаем параметрический возбуждение благодаря нелинейным членам уравнений (6),(7), и, как будет показано ниже, на определённых частотах ω_{ex} внешнего воздействия может возникнуть параметрический резонанс. Отметим, что обычная теория параметрического резонанса для гармонического осциллятора, [73], здесь неприменима, поскольку уравнения движения (6)–(7) цепочек φ_n, a_n, b_n нелинейны.

Результаты численного моделирования показывают, что имеет место параметрический резонанс. Существует порог A_{min} , зависящий от параметра диссипации γ , такой что резонанс имеет место при амплитудах внешнего воздействия больших $A \geq A_{min}$, как показано на рисунках 7 и 8. Если частота внешнего воздействия близка к резонансной, A_{min} зависит линейно от диссипации γ , см. рис. 7, причём для малых γ , также мало и A_{min} , а при $\gamma = 0$ $A_{min} = 0$. В случае, когда частота воздействия существенно отличается от резонансной, наблюдается пороговое значение A_{min} при $\gamma = 0$, см. рис. 8.

На рисунке 10 можно видеть полученную нами локализованную моду на резонансной частоте внешнего воздействия для $\gamma = 0.01$, $A = 0.1$; на рис. 11 для $\gamma = 0.8$, $A = 1.3$. Можно заметить, что те же участки a - и b - цепочек возбуждаются на одной частоте $\omega = 1.489$.

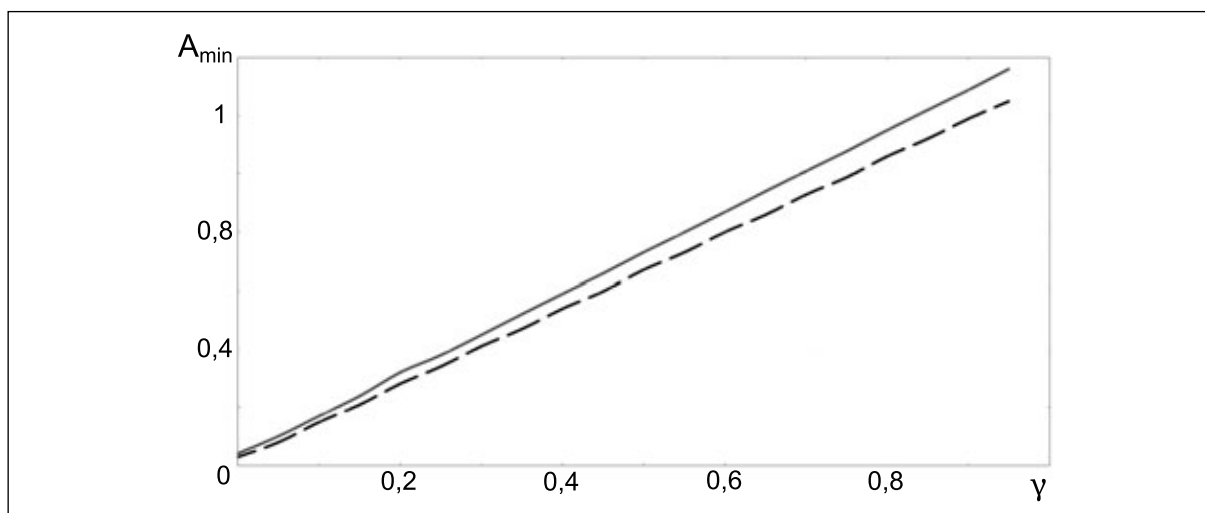


Рис. 7. Минимальное значение A_{min} в зависимости от диссипации γ . Внешние воздействия на резонансных частотах 1.3 (пунктир) и 1.4 (сплошная линия). Можно аппроксимировать графики прямыми $1.296\gamma + 0,019$ и $1.395\gamma + 0,033$, соответственно.

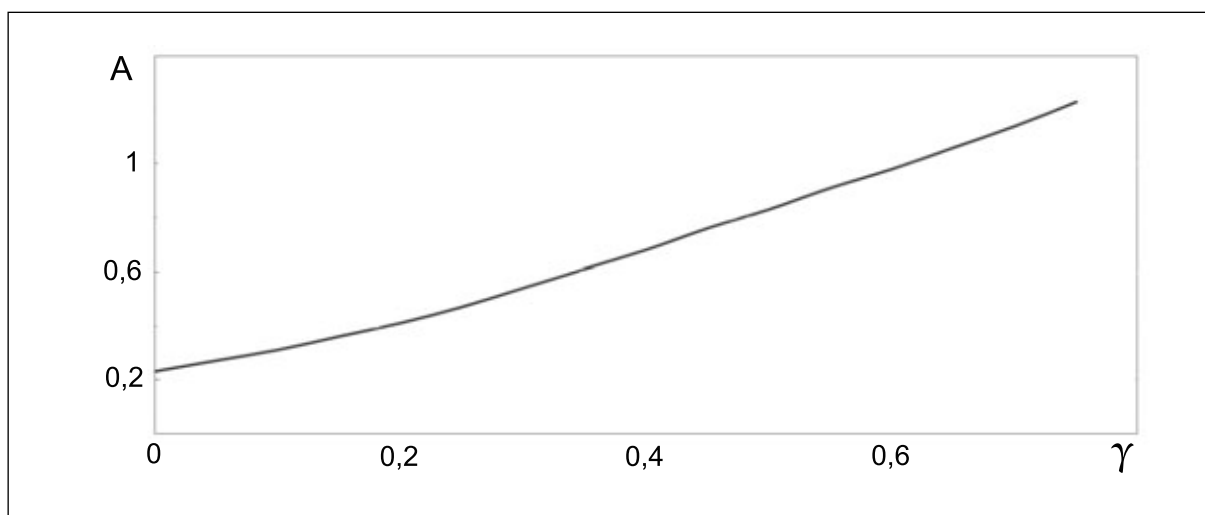


Рис. 8. Пороговое значение A_{min} в зависимости от диссипации γ . частота внешнего воздействия 1.55 (нерезонансная). Число узлов $N = 300$, масса $m = 1$; параметры жесткости $\tau = 1$ или 1.5 (с равными вероятностями); $\varepsilon = 1$; $k = 0.1$ или 0.15 (с равными вероятностями); $I = 10$. Значение A_{min} при $\gamma = 0$ заметно отлично от нуля.

7. Гиперзвуковая спектроскопия ДНК.

Гиперзвуковая спектроскопия является перспективным методом исследования упругой динамики ДНК. Мы считаем, что звуковая спектроскопия может оказаться полезной для анализа конформационной структуры ДНК, исходя из анализа её фононных мод. Построенная нами модель качественно согласуется с экспериментальными данными касательно фононных мод и оценкой порядка резонансных частот.

Кроме того, гиперзвуковое воздействие может быть использовано в качестве инструмента анализа длинных молекул ДНК. Поскольку локализованные моды распространяются лишь на несколько пар оснований, то, если удастся найти частоту, соответствующую локализованной моде определённой последовательности пар оснований, то такое воздействие может привести к расхождению нитей только на этом участке.

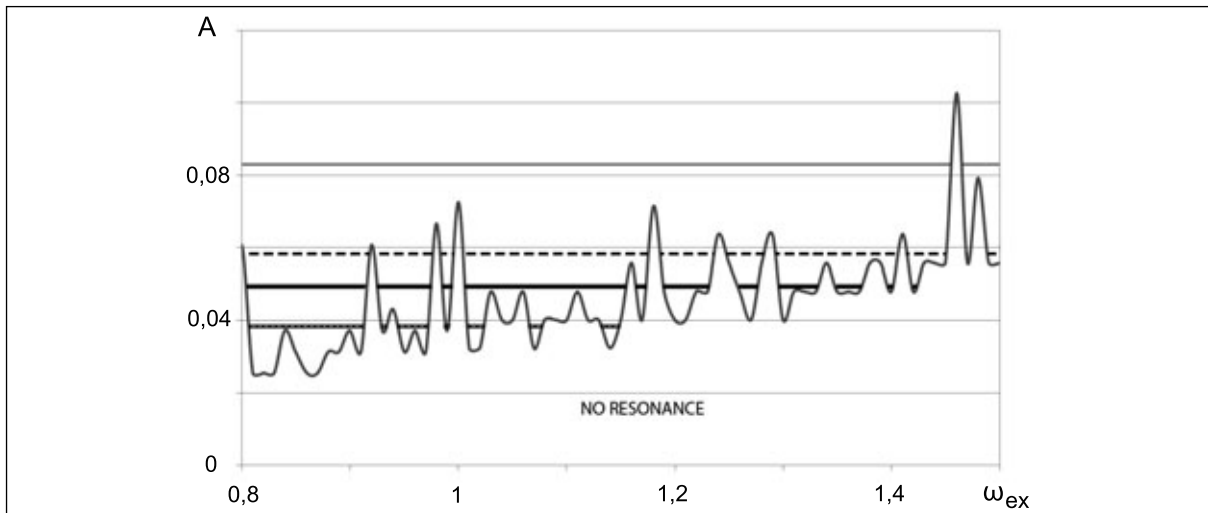


Рис. 9. Минимальное значение амплитуды, для которой наблюдается резонанс, $A_{min}(\omega)$, в зависимости от частоты.

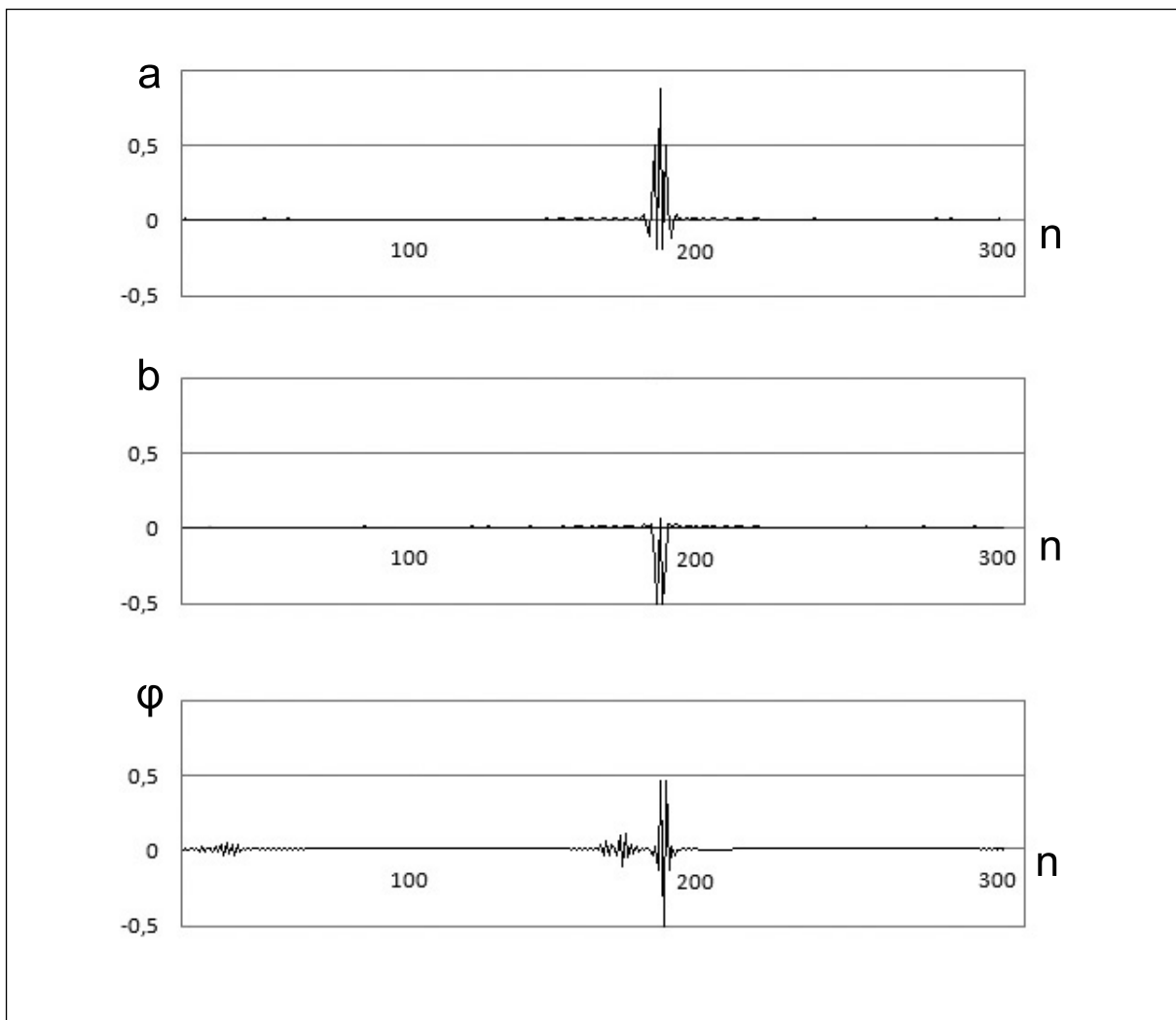


Рис. 10. Локализованное возбуждение. Графики соответствуют a –, b –, φ – модам (сверху вниз). Диссипативный коэффициент $\gamma = 0.01$. Все величины приведены во введенных выше единицах. $N = 300, m = 1; \tau = 1$ или 1.5 (равновероятно); $\varepsilon = 1; k = 0.1$ или 0.15 (равновероятно); $I = 10$; внешнее воздействие с амплитудой $A = 0.1$; на частоте $\omega = 1.489$. Состояние модели через 1000 периодов внешнего возбуждения.

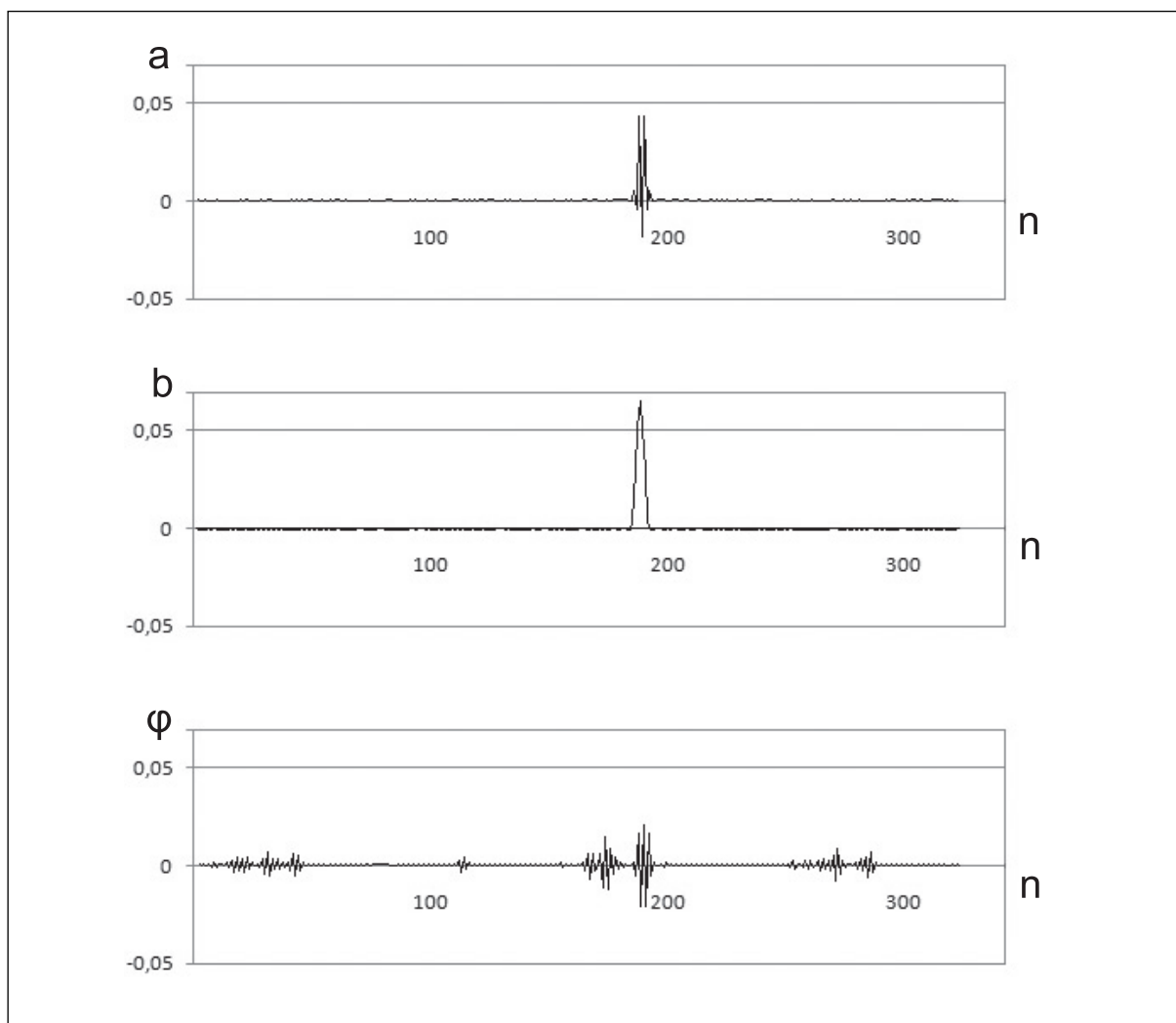


Рис. 11. Локализованное возбуждение. Графики соответствуют a –, b –, φ – модам (сверху вниз). Диссипативный коэффициент $\gamma = 0.8$. Все величины приведены во введенных выше единицах. $N = 300, m = 1; \tau = 1$ или 1.5 (равновероятно); $\varepsilon = 1; k = 0.1$ или 0.15 (равновероятно); $I = 10$; внешнее воздействие с амплитудой $A = 1.3$; на частоте $\omega = 1.489$. Состояние модели через 760 периодов внешнего возбуждения.

Другим применением описанного подхода может стать экспериментальное изучение гидродинамики на нанометровых масштабах и гигагерцовых частотах.

Остается проблема, касающаяся учёта эффектов диссипации. Стандартная модель Навье-Стокса даёт величину диссипации, которая противоречит реально наблюдаемому возникновению фононных мод, [58]. Роль диссипации, возможно, совершенно иная, чем та, которую предполагает модель Навье-Стокса. Она может оказаться решающей для понимания природы взаимодействия молекул со средой на нано-масштабах. В этом смысле, гиперзвуковая спектроскопия может оказаться полезным средством для изучения этого взаимодействия. Так, растворы ДНК можно использовать как образец для изучения гидродинамики гиперзвуковых частот.

Литература

1. *Kundt A.* // Pogg. Ann. 1868, **135**, 337.
2. *Стрэтт Дж.В. (Лорд Рэлей)*, Теория Звука, Том II // ГИТТЛ, Москва, 1955, 475с.
3. *Мандельштам Л.И.* К вопросу о рассеянии света неоднородной средой // ЖРФХО 1926, **58**, 381-386.
4. *Leontovich M.* Relaxation in liquids and scattering of light // J.Phys. USSR 1941, **4**, 499-514.
5. *Low W.* Brillouin scattering in ordinary liquids // J.Phys.Colloques 1972, **33**, C1-1-C1-5.
6. *Shaham-Bronstein J., Sarid D., Low W.*, Phase velocity and attenuation of hypersound in water of different isotopic constitution // J. Chem.Phys. 1970, **52**, 3201, 3pp.
7. *Фабелинский И.Л.* Молекулярное рассеяние света, Гл.6 // Москва, Наука, 1965, 521 стр.
8. *Лямяшев Л.М.* Лазеры в акстике // УФН 1987, **151**, 479-527.
9. *Ганапольский Е.М., Чернец А.Н.*, Возбуждение гиперзвука медленными электромагнитными волнами // ДАН СССР 1963, **149** (1), 72-75.
10. *Townes E.H.*, About phonon maser, in Quantum electronics: Proc. First conf. Ed. E.H.Townes // New Jersey, 1960, 405-409.
11. *Альтиулер С.А., Козырев Б.М.*, Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп, 2 изд. // М.: Наука, 1972, 672 с.
12. *Ганапольский Е.М., Королюк А.П.*, Акустические резонансные явления в твердом теле // Радиофизика и электроника 2008, **13**, 404-422.
13. *Foa Torres L.E.F., Pastawski H.M., Makler S.S.*, An ultrasound emitter based on assisted tunneling // Solid State Communications 2002, **124**, 363-371.
14. *Camps I., Makler S.S., Pastawski H.M., Foa Torres L.E.F.*, GaAs-Alx Ga1-x As double-barrier heterostructure phonon laser: A full quantum treatment // Physical Review B 2001, **64**, 125311, 13pp.
15. *Huynh A., Perrin B., Lanzillotti-Kimura N.D., Jusserand B., Fainstein A., Lematre A.*, Sub-Terahertz Monochromatic Transduction with Semiconductor Acoustic Nanodevices // arXiv: 0803.2090v1, 2008, 5pp.
16. *Huynh A., Lanzillotti-Kimura N.D., Jusserand B., Perrin B., Fainstein A., Pascual-Winter M.F., Peronne E., Lematre A.*, Subterahertz Phonon Dynamics in Acoustic Nanocavities // Phys.Rev.Lett. 2006, **97**, 115502, 4pp.
17. *Grudin I.S., Hansuek Lee, Painter O., Kerry J.Vahala* Phonon Laser Action in a Tunable Two-Level System // Phys.Rev.Lett. 2010, **104**, 083901, 4pp.
18. *Beardsley R.P., Akimov A.V., Henini M., Kent A.J.* Coherent Terahertz Sound Amplification and Spectral Line Narrowing in a Stark Ladder Superlattice // Phys.Rev.Lett. 2010, **104**, 085501, 4pp.
19. *Фабелинский И.Л.* Исследование тонкой структуры линии рассеяния света и распространение гиперзвука // Усп.Физ.Наук 1965, **87** (1), 9 стр.
20. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика, том VII, Теория упругости, Гл.II // Москва, Наука 1987, 248 с.
21. *Френкель Я.И.* Кинетическая теория жидкости // Л.: Наука, 1975, 592с.
22. *Urabe H., Tominaga Y.*, Low frequency Raman spectra of DNA // J.Phys.Soc. Japan, 1981, **50**, 3543-3544.
23. *Liu C., Edwards G.S., Morgan S., Silberman E.*, Low-frequency, Raman-active vibrational modes of poly(dA)-poly(dT) // Phys.Rev.A 1989, **40** (12), 7394-7397.
24. *Lindsay S.M., Powell J.*, Structure and Dynamics: Nucleic Acids and Proteins, eds. Clementi E. and Sarma R. // Adenine Press, New York, 1983, 241p .
25. *Mei W.N., Kohli M., Prohofsky E.M., Van Zandt L.L.*, Acoustic modes and nonbonded interactions of the double helix // Biopolymers 1981, **20** (4), 833-853.
26. *Putnam B.F., Van Zandt L.L., Prohofsky E.W., Mei W.N.*, Resonant and localized breathing modes in terminal regions of the DNA double helix // Biophysical Journal 1981, **35** (2), 271-287.
27. *Saxena V.K., Van Zandt L.L.* Local modes in a DNA polymer with hydrogen bond defect // Biophysical Journal 1994, **67** (6), 2448-2453.
28. *Weidlich T., Lindsay S.M., Rui Q., Rupprecht A., Peticolas W.L., Thomas G.A.*, A Raman study of low frequency intrahelical modes in A-, B-, and C-DNA // J.Biomol.Struc.Dynam. 1990, **8** (1), 139-71.
29. *Krisch M., Mermet A., Grimm H., Forsyth V.T., Rupprecht A.* Phonon dispersion of oriented DNA by inelastic x-ray scattering // Phys.Rev.E 2006, **73** (6), 061909, 10pp.
30. *Pal S.K., Zhao L., Zewail A.H.*, Water at DNA surfaces: Ultrafast dynamics in minor groove recognition // PNAS 2003, **100** (14), 8113-8118.
31. *Chia C.Shih, Georghiou S.* Harmonic analysis of DNA dynamics in a viscous medium // J.Biomol.Structure.Dynamics 2000, **17** (5), 921, 32pp.
32. *El Hassan M.E., Calladine C.R.* The Assessment of the Geometry of Dinucleotide Steps in Double-Helical DNA; a New Local Calculation Scheme // J.Mol.Biol. 1995, **251** (5), 648-664.
33. *Лифшиц И.М., Гредескул С.А., Пастур Л.А.* Введение в теорию неупорядоченных систем // Москва, Наука 1982, 359с.

34. Лифшиц И.М., Розенцвейг Л.Н., //Изв. АН СССР, сер. физ. 1948, **12**, 667.
35. Лифшиц И.М., Оптическое поведение неидеальных кристаллических решеток в инфракрасной области // ЖЭТФ 1942, **12**, 117-156.
36. Лифшиц И.М., О вырожденных регулярных возмущениях // ЖЭТФ 1947 **17**, 1017-1076.
37. Лифшиц И.М., Некоторые проблемы динамической теории неидеальных кристаллических решеток // Nuovo Cimento, Suppl. 1956, **3**, 4-10.
38. Марч Н., Паринелло М., Коллективные эффекты в твёрдых телах и жидкостях, Гл. 3 // Москва, Мир 1986, 320с.
39. Марадудин А., Монтрол Э., Вейс Дж. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении, Гл. 5 // Москва, Мир, 1965, 367с.
40. Kosevich Yu.A., Capillary phenomena and macroscopic dynamics of complex two-dimensional defects in crystals // Progress in Surface Science 1997, **55**, 1-57.
41. Kosevich A.M. The Crystal Lattice. Phonons, Solitons, Dislocations, Superlattices // WILEY-VCH Verlag, Weinheim. 2005, 345p.
42. Kosevich Yu.A., Syrkin E.S., Kosevich A.V. Vibrations localized near surfaces and interfaces in nontraditional crystals // Progress in Surface Science 1997, **55**, 59-111.
43. Kosevich Yu.A., Multichannel propagation and scattering of phonons and photons in low-dimension nanostructures // Physics-Uspekhi 2008, **51** (8), 848-863.
44. Займан Дж., Модели беспорядка // Москва, Мир 1982, 592с.
45. Anderson P.W., Absence of diffusion in certain random lattices // Phys.Rev. 1958, **109**, 1492-1505.
46. Харрисон У., Теория твердого тела, Гл. 4 // М.: Мир 1972, 616с.
47. Стрэтт Дж.В., (Лорд Рэлей), Теория Звука, Том I, Гл. 4 // ГИТТЛ, Москва 1940, 503с.
48. Dean P., On Disordered One-dimensional Crystals // Proc.Phys.Soc. 1959, **73** (3), 413-446.
49. Møller H.B., Mackintosh A.R., Observation of Resonant Lattice Modes by Inelastic Neutron Scattering // Phys.Rev.Lett. 1965, **15** (15), 623-625.
50. Cunningham R.M., Muhlestein L.D., Shaw W.M., Tompson C.W., Investigation of In-Band Resonant Modes in Cr-W Alloys by Inelastic Neutron Scattering // Phys.Rev.B 1970, **2** (12), 4864-4870.
51. Sivers A.J., Takeno S., Isotope Shift of a Low-Lying Lattice Resonant Mode // Phys.Rev. 1965, **140** (3A), A1030-A1032.
52. Dean P., Martin J.L., A Method for Determining the Frequency Spectra of Disordered Lattices in Two-Dimensions // Proc.R.Soc.Lond.A 1960, **260** (1298), 409-418.
53. John SantaLucia, Jr., A unified view of polymer, dumbbell, and oligonucleotide DNA nearest-neighbor thermodynamics // PNAS 1988, **95** (4), 1460-1465.
54. Ju J., Thesis // Stevens Institute of Technology, 2001.
55. Tominaga Y., Shida M., Kubota K., Urabe H., Nishimura Y., Tsuboi M., Coupled dynamics between DNA double helix and hydrated water by low frequency Raman spectroscopy // J.Chem.Phys. 1985, **83**, 5972, 4p.
56. Scroll W.K., Prabhu V.V., Prohofsky E.W., Van Zandt L.L., Phonon interpretation of inelastic neutron scattering in DNA crystals // Biopolymers 1989, **28** (7), 1189-1193.
57. Powell J.W., Edwards G.S., Genzel L., Kremer F., Wittlin A., Kubasek W., Peticolas A., Investigation of far-infrared vibrational modes in polynucleotides // Phys.Rev.A 1987, **35** (9), 3929-3939.
58. Woolard D.L., Globus T.R., Gelmont B.L., Bykhovskaia M., Samuels A.C., Cookmeyer D., Hesler J.L., Crowe T.W., Jensen J.O., Jensen J.L., Loerop W.R., Submillimeter-wave phonon modes in DNA macromolecule // Phys.Rev.E 2002, **65** (5), 051903, 11p.
59. Woolard D.L., Koscica T., Rhodes D.L., Cui H.L., Pastore R.A., Jensen J.O., Jensen J.L., Loerop W.R., Jacobsen R.H., Mittleman D., and Nuss M.C. Millimeter Wave-induced Vibrational Modes in DNA as a Possible Alternative to Animal Tests to Probe for Carcinogenic Mutations // J.Appl.Toxicology 1997, **17** (4), 243-246.
60. Kovaleva N.A., Manevitch L.I., Localized nonlinear oscillation of DNA molecule // Proceedings of 8th Conference on Dynamical Systems Theory and Application, Lodz, Poland, 2005, p.103.
61. Kovaleva N.A., Manevitch L.I., Smirnov V.V. Analytical study of coarse-grained off-lattice model of DNA // DSTA-2007, 9th International Conference on Dynamical Systems: Theory and Applications, Lodz, Poland.
62. Prohofsky E.W., Quasi-momentum conservation and motion along the DNA double helix // Comments Mol.Cell.Biophys. 1983, **2**, 65.
63. Kim Y., Prohofsky E.W., Vibrational modes of a DNA polymer at low temperature // Phys.Rev.B 1987, **36** (6), 3449-3451.
64. Kovaleva N.A., Manevich L.I., Musienko A.I., Savin A.V., Modeling low-frequency localized oscillations of the DNA double strand // Polym.Sc. A 2009, **51**, 7, 833.
65. Van Zandt L.L., Resonant Microwave Absorption by Dissolved DNA // Phys.Rev.Lett. 1986, **57** (16), 2085-2087.

66. *Golo V.L.*, The three-wave interaction between inter-strand modes of the DNA // JETP 2005, **128** (2), 428-435.
67. *Capellmann H., Biem W.*, Eigenschwingungen von Doppelspiralen aus diskreten Massenpunkten // Z.Phys. 1968, **209** (3), 276-288.
68. *Watson J.D., Crick F.H.C.*, Molecular structure of nucleic acids // Nature 1953, **171**, 737-738.
69. *Donohue J., Trueblood K.N.*, Base pairing in DNA // J.Mol.Biol. 1960, **2** (6), 363-371.
70. *Kirchhoff G.R.* Vorlesungen über mathematische Physik // Mechanik, Leipzig, Teubner 1883, 294p.
71. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика, том VI, Гидродинамика, Гл. VIII // Москва, Наука 1988, 728с.
72. *Adair R.K.* Vibrational resonances in biological systems at microwave frequencies // Biophys.J. 2002, **82** (3), 1147-1152.
73. *Rayleigh J.W.* The Theory of Sound, vol. 1, Ch.3 // New York, Dover Publications 1926, 370p.

HYPER SOUND SPECTROSCOPY OF LOCALIZED INTER-STRAND MODES OF THE DNA

V.N. Blinov and V.L. Golo

*Lomonosov Moscow State University,
Mechanics&Mathematics Department*

blinov.veniamin@gmail.com, voislav.golo@gmail.com

Received 30.05.10

We consider a model of the DNA molecule that takes into account a random character of the nucleotide sequence. We make numerical simulation of elastic modes and find their localization, in accord with the general theory worked out by I.M. Lifshitz for the dynamics of random media. We come to the conclusion that the pumping of hypersound could be a means for generating the above modes through a parametric resonance.