Internet Electronic Journal*

Nanociencia et Moletrónica

Diciembre 2008, Vol. 6, N°2, pp. 1263-1272

Derivación de la Ecuación no lineal de Schrödinger para el Modelo de DNA: Dinámica de los "*breathers*"

V.N. Serkin[1], T.L. Belyaeva[1], E. V. Villagran[1], L.L. Morales[3], L.M. Kovachev[2], R. M. Peña[1], G.H. Corro[1]

[1]Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Centro de Química-ICUAP
Complejo de Ciencias, Ciudad Universitaria, Puebla 72570, **México**
[2]Instituto de Electrónica, Academia de Ciencias de Bulgaria, **Bulgaria**
[3]Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Puebla, Pue., **México**; Tel. + (222) 2 29 55 00, ext. 7284
e-mail: vserkin@yahoo.com

recibido: 03.07.08 revisado: 16.09.08 publicado: 31.12.08

Citation of the article;
V.N. Serkin, T.L. Belyaeva, E. V. Villagran, L.L. Morales, L.M. Kovachev, R. M. Peña, G.H. Corro, Derivación de la Ecuación no lineal de Schrödinger para el Modelo de DNA: Dinámica de los "breathers", Internet Electron. J. Nanoc. Moletrón. 2008, Vol.6, N°2, pp 1263-1272

Derivación de la Ecuación no lineal de Schrödinger para el Modelo de DNA: Dinámica de los "*breathers*"

V.N. Serkin[1], T.L. Belyaeva[1], E. V. Villagran[1], L.L. Morales[3], L.M. Kovachev[2], R. M. Peña[1], G.H. Corro[1]

[1]Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Centro de Química-ICUAP
Complejo de Ciencias, Ciudad Universitaria, Puebla 72570, **México**
[2]Instituto de Electrónica, Academia de Ciencias de Bulgaria, **Bulgaria**
[3]Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Puebla, Pue., **México**; Tel. + (222) 2 29 55 00, ext. 7284
e-mail: vserkin@yahoo.com

recibido: 03.07.08 revisado: 16.09.08 publicado: 31.12.08

Internet Electron. J. Nanoc. Moletrón., 2008 Vol. 6, N° 2, pp. 1263-1272

Abstract. En el presente artículo se presenta un modelo bidimensional para el DNA. Por medio del método de múltiples escalas se llega a la ecuación no lineal de Schrödinger. Al sistema se le perturba con un potencial armónico externo y por medio de la teoría de la perturbación adiabática se aplican las soluciones del efecto de desnaturalización reversible e irreversible de solitones. Este desarrollo puede emplearse como un modelo simple para la explicación del proceso de desnaturalización del DNA. Otro resultado conclusivo es la descripción de los "breathers", ya que al haber obtenido una solución de este tipo a partir de nuestro modelo, resulta ser una buena explicación para el "breathing" de la molécula de DNA, esto es el movimiento de alejamiento y acercamiento de las hebras una hacia la otra.

1. Introducción

La dinámica de la trascripción del DNA es uno de los problemas más fascinantes en la biología molecular moderna debido a que este proceso es la base de la vida. Sin embargo, es también un problema muy complicado debido al papel tan complejo que juega el RNA polimerasa en el proceso. Ya ha quedado bien establecido que la desnaturalización local del DNA está involucrada en el proceso, así que es interesante investigar la desnaturalización de la doble hélice como un paso preliminar en el entendimiento de la trascripción.

La posibilidad de que los efectos no lineales pudieran concentrar energía vibracional en el DNA fue desarrollada inicialmente por Krumhansl y colaboradores [1], quienes sugirieron una teoría de excitaciones solitónicas como explicación de los estados abiertos del DNA. Estudios relacionados con solitones en el DNA también fueron presentados por Yomosa [2], quien propuso una teoría usando un modelo de bases planas giratorias. Este modelo fue refinado después por Takeno y Homma [3], quienes introdujeron efectos de discreticidad, y por Zhang [4], quien mejoró el modelo para el acoplamiento de bases. M. Peyrard y A. R. Bishop [5] investigaron la mecánica estadística de un modelo de red simple para la desnaturalización del DNA de doble hélice. En el presente trabajo se aplican esos resultados en el modelo para el DNA con el fin de investigar el surgimiento de los estados abiertos y la desnaturalización de la molécula.

2. La Ecuación No lineal de Schrödinger para el Modelo de DNA y dinámica de los "*breathers*"

El Hamiltoniano del sistema es:

$$H = \sum_n \frac{1}{2}\left(dt\frac{dY}{dt}\right)^2 + \frac{1}{2}S\left(Y_n - Y_{n-1}\right)2 + \left(e^{-Yn} - 1\right) \tag{1}$$

Partiendo de las ecuaciones de movimiento del modelo que se derivan de (1),

$$\frac{1}{2}\frac{d^2Y}{d\tau^2} = S\left(Y_{n+1} + Y_{n-1} - 2Y_n\right) + 2e^{-Yn}\left(e^{-Yn} - 1\right) \tag{2}$$

Estas forman un conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales acopladas que no tienen solución exacta. Ahora introducimos una expansión de pequeña amplitud que sólo mantenga las primeras no linealidades, definiendo:

$$Y_n = \varepsilon\phi_n \tag{3}$$

con ε<<1 y manteniendo solo los términos importantes en la expansión,

$$\frac{d^2\phi}{d\tau^2} = \mathrm{S}(\phi_{\mathrm{n+1}} + \phi_{\mathrm{n-1}} - 2\phi_{\mathrm{n}}) - 2(\phi_{\mathrm{n}} - 3/2\varepsilon\phi_{\mathrm{n}}{}^2 + 7/6\varepsilon^2\phi_{\mathrm{n}}{}^3) = 0 \tag{4}$$

Se puede ahora buscar soluciones de este conjunto de ecuaciones, que se prolongue más allá de las soluciones de simples ondas planas que tendríamos en una aproximación lineal, esas soluciones serían de la forma

$$\phi_{\mathrm{n}}(\tau) = (\mathrm{F_n e}^{i\theta \mathrm{n}} + \mathrm{F*}_{\mathrm{n}}\,\mathrm{e}^{\text{-i}\phi_{\mathrm{n}}}) + \varepsilon(\mathrm{G_n} + \mathrm{H_n e2i}\theta_{\mathrm{n}} + \mathrm{H_n} * \mathrm{e}^{\text{-2i}\theta}{}_{\mathrm{n}}) \tag{5}$$

con $\theta_n = qn\text{-}\omega t$.

La elección de los términos adicionales será justificada después pero es fácil comprender su origen: dado que las ecuaciones contienen un término $\varepsilon\phi_n^2$, la presencia del término dominante en la solución (5) proporcional a $e^{\pm i\theta n}$ generará naturalmente términos similares al factor ε en la solución, esto es, sin una contribución exponencial o dependiendo de $e^{\pm 2i\theta n}$. Más aún, como la solución (5) aparece como una onda plana modulada, la cual en el límite armónico mantendrá una amplitud fija, es natural suponer que los coeficientes F_n, G_n, H_n tendrán sólo una suave dependencia espacial cuando la no linealidad sea incluida. Se asumirá que esas funciones dependan solo de variables "lentas" $X_1=\varepsilon x$, $X_2=\varepsilon^2 x$, $T_1=\varepsilon\tau$, $T_2=\varepsilon^2\tau$ y su dependencia espacial estará más bien descrita por una aproximación al límite continuo, las cuales tienden a reemplazar las funciones en los sitios $n\pm 1$ por su expansión de Taylor

$$\mathrm{F_{n\pm 1}} = \mathrm{F} \pm \varepsilon\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{X_1}} \pm \varepsilon^2\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{X_2}} + \frac{\varepsilon^2}{2}\frac{\partial^2 \mathrm{F}}{\partial \mathrm{X^2{}_1}} \tag{6}$$

Las derivadas temporales de esas expresiones son de la forma

$$\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial \tau_1} = \varepsilon\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial T_1} + \varepsilon^2\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial T_2} \tag{7}$$

con ecuaciones similares para G y H.

Al introducir esas expresiones en las ecuaciones de movimiento, hasta orden ε^0 , la cancelación de los términos en $\exp(\pm i\theta_n)$ muestra que las ecuaciones son satisfechas si ω y q están relacionadas por la relación de dispersión que se tiene para ondas planas en el límite armónico

$$\omega^2 = 2 + 4\mathrm{Ssen^2(q/2)} \tag{8}$$

Esta es la relación de dispersión que corresponde a una red discreta, lo que significa que a pesar de la aproximación del límite continuo llevado acabo para las funciones *F, G y H,* los cálculos preservan cierta discreticidad, lo cual es importante para el DNA. Es por ello que esta aproximación es llamada la semidiscreta.

En orden ε^1, la cancelación de términos en $\exp(\pm i\theta_n)$ da

$$\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial T_1} + v_g \frac{\partial \mathrm{F}}{\partial X_1} = 0 \tag{9}$$

donde

$$v_g = (S \sin q)/\omega$$

v_g es la velocidad de grupo de las ondas que tienen relación de dispersión (8). En el mismo orden, los términos sin una dependencia exponencial y términos en $\exp(2i\theta_n)$ dan

$$G = 3FF^* \tag{10}$$

$$\mathrm{H} = -\frac{1}{2}\frac{\mathrm{F}^2}{1 + \frac{8\mathrm{S}}{3}\sin^4(\mathrm{q}/2)} \tag{11}$$

Se puede notar que los términos *G y H* en la solución (5) son necesarios para permitir la cancelación de los términos de orden ε^1 en las ecuaciones de movimiento.

La ecuación más interesante se obtiene con la cancelación de términos en $\exp(i\theta_n)$ para el orden ε^2. En un marco móvil a velocidad v_g se reduce a la ecuación NLS,

$$\mathrm{i}\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial \tau} + \mathrm{P}\frac{\partial^2 \mathrm{F}}{\partial \xi^2} + \mathrm{Q}\,|\,\mathrm{F}\,|^2 = 0 \tag{12}$$

donde los coeficientes *P y Q* dependen del vector de onda *q* de la onda portadora de acuerdo con

$$\mathrm{P} = \frac{\mathrm{S}\omega^2 \cos \mathrm{q} - \mathrm{S}^2 \sin^2 \mathrm{q}}{2\omega^3} \tag{13}$$

$$\mathrm{Q} = \frac{1}{2\omega}\left(11 - \frac{9}{3 + 8\mathrm{S}\sin^4(\mathrm{q}/2)}\right) \tag{14}$$

El producto *PQ* es positivo para toda $q<(\pi/2)$ así que es posible esperar soluciones localizadas cuando la onda portadora tiene un pequeño vector de onda.

Al sistema (12) podemos someterlo a una perturbación de tipo potencial armónico externo para simular el efecto del entorno del DNA

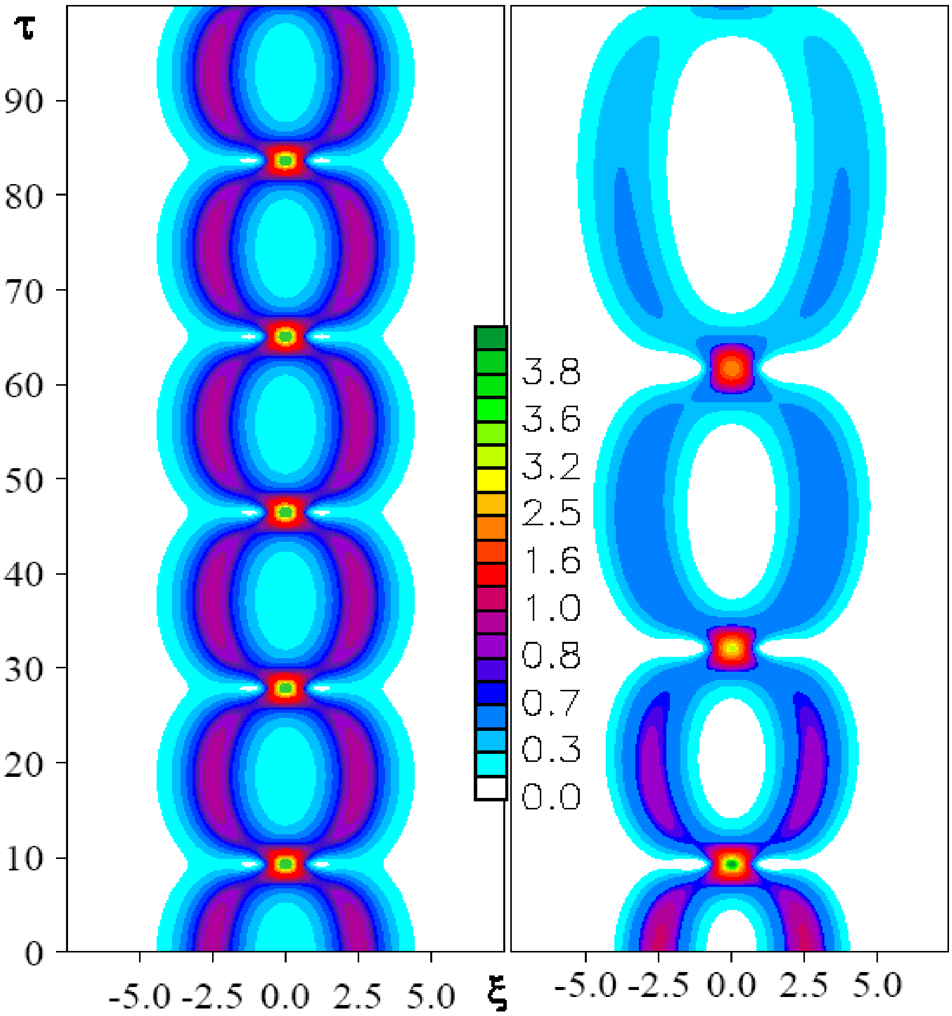
$$i\frac{\partial F}{\partial \tau_2} + P\frac{\partial^2 F}{\partial \xi_1{}^2} + Q\,|\,F\,|^2 = i\varepsilon(F) \qquad (15)$$

La solución de la ecuación (15) se obtiene vía la teoría de la perturbación adiabática [6-9].

Otra forma de llegar a esta ecuación es utilizando el análisis de Kaup y Newell [6], en el cual, para reducirla a una forma más genérica se asume que la frecuencia del sistema libre es muy cercana a la del sistema externo.

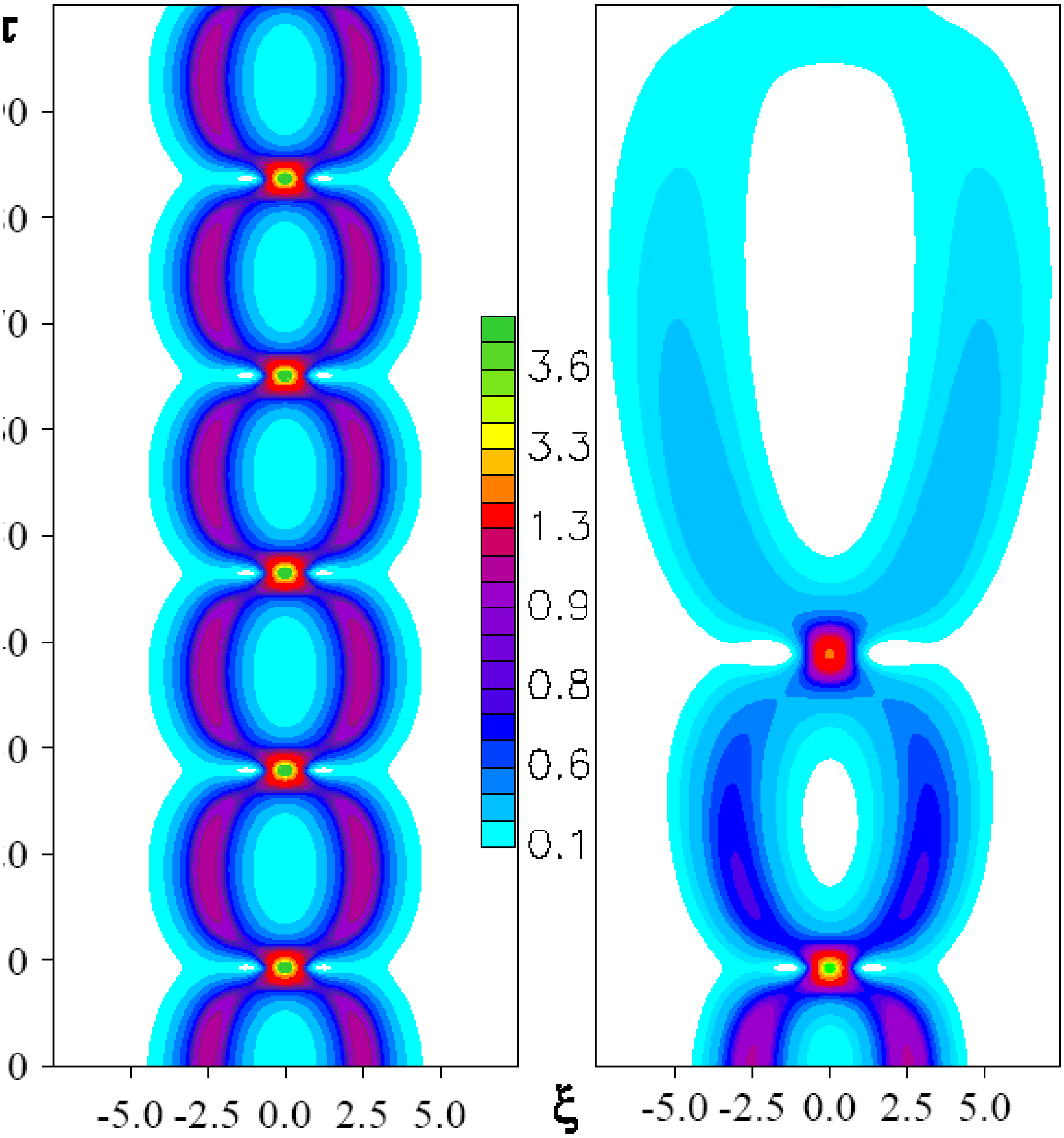
Por otro lado, por la analogía con la teoría de solitones ópticos [6-9], también podemos considerar que se puede obtener para nuestro sistema biológico.
Nuestro problema ahora es resolver la ecuación (15) y analizar los resultados.

Para ello, podemos usar métodos computacionales y analogías con solitones ópticos.
Ahora, en la presencia de una perturbación como absorción lineal, la dinámica nolineal de los “breathers” se modifica. Ver figuras 1 y 2.



(a) (b)

Fig. 1. Solitón "*breather*" calculado en el marco del modelo de la NLSE dado por la Ecuación (15) con épsilon=0 (a) y con épsilon=0.001 (b).



(a) (b)

Fig. 2. Comparación de la dinámica del solitón ideal “breather” (a) con proceso de desnaturalización calculado por épsilon=0.01 (b).

Por ejemplo, para solitones en fase se puede formar un estado estacionario. La formación de un estado estacionario de un par interactuante de solitones se presenta en las figuras 1a y 2a. La variación de la perturbación permite notar el efecto de la “desnaturalización” reversible e irreversible de los breathers, en el cual el periodo de oscilaciones de los solitones NLSE cambia en una manera controlable hasta la completa separación o desintegración del estado ligado, ilustrado en las figuras 1-2. En los cálculos se utilizaron las siguientes posibilidades: absorción 0.001 para la figura 1 y absorción 0.01 para la figura 2. Estas funciones permitieron modelar el apagado y encendido de la rampa armónica.

3. Conclusión

En resumen, podemos decir que al plantear un modelo del DNA se ha llegado a la NLSE. Por medio del método de múltiples escalas se llega a la ecuación no lineal de Schrödinger. Al sistema se le perturba con un potencial armónico externo y por medio de la teoría de la perturbación adiabática se aplican las soluciones del efecto de desnaturalización reversible e irreversible de solitones. Este desarrollo puede emplearse como un modelo simple para la explicación del proceso de desnaturalización del DNA. Otro resultado conclusivo es el de la descripción de los “breathers”, ya que al haber obtenido una solución de este tipo a partir de nuestro modelo, resulta que es una buena explicación para el “breathing” de la molécula de DNA, esto es el movimiento de alejamiento y acercamiento de las hebras una hacia la otra.

Bibliografía

[1] J.A. Krumhansl and D.M. Alexander, in Structure and Dynamics: Nucleic Acids and Proteins, edited by E. Clementi and R.H. Sarma (Adenine, New York, 1983), pp. 61-80.
[2] Yomosa, J. Phys. Soc. Jpn. 51, 3318 (1982); 52, 1866 (1983); Phys. Rev. A 27, 2120 (1984); 30, 474 (1984).
[3] Takeno y Homma, Prog. Theor. Phys. 70, 308 (1983).
[4] L.T. Zhang, Phys Rev. A 35, 886 (1987).
[5] M. Peyrard and A.R. Bishop, Phys. Rev. Lett. 62 (23), 2755-2758, (1989).
[6] A. Hasegawa, and Y. Kodama, Soliton in optical comunications,Oxford, 1995.
[7] A. Hasegawa, M. Matsumoto. Optical Soliton in Fibers (Berlin Springer, 2003).
[8] V.I. Karpman, Physica Scripta 20, 462 (1979).
[9] V.I. Karpman, V.V. Soloviev, Physica 3D, 487 (1981).
[10] D.J. Kaup, A.C. Newell, Phys. Rev. B, 18, 10 (1978).