

## ИМИТАЦИОННАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛЫ ДНК И АЛЬФА ЧАСТИЦЫ<sup>1</sup>

*И.В.Крейле, Н.М. Щербо*

Объектом исследования в данной работе является математическая модель взаимодействия молекулы ДНК с альфа частицами. Целью является исследование влияния малых доз излучения на организм человека. Результатом является разработанная математическая модель взаимодействия молекулы ДНК с альфа частицами.

Ключевые слова: молекула ДНК, альфа частиц, взаимодействие

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Целью работы является исследование взаимодействия молекулы ДНК с альфа частицами на имитационной модели. Эта цель реализуется созданием программы, с помощью которой можно определять, как от скорости движения альфа-частицы зависит состояние молекулы ДНК после попадания в нее альфа-частицы.

Такая модель необходима для работы лаборатории физики и микробиологии по изучению влияния радиоактивных излучений на клетки организма, и непосредственно ДНК.

### 2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Математическая модель состоит из двух частей:

- моделирование молекулы ДНК и альфа-частицы
- моделирование процесса взаимодействия молекулы ДНК и альфа-частицы

При моделировании молекулы ДНК стоит задача моделирования устойчивого состояния молекулы ДНК [1].

Известны координаты каждого нуклеотида в трехмерном пространстве. Сила взаимодействия, между ее мономерами зависит от расстояния между ними  $r$  и определяется с помощью потенциала Морзе

$$U(r) = J \{ \exp[-2a(r-r_0)] - 2 \exp[-a(r-r_0)] \}, \quad (1)$$

где  $J$  и  $a$  – параметры потенциальной энергии взаимодействия между нуклеотидами;

$r_0$  – расстояние между нуклеотидами, соответствующее минимуму энергии.

Разложив потенциал в ряд Тейлора получим полином четвертой степени, аппроксимирующий силу взаимодействия  $F(r)$

$$F(r) = -\frac{dU(r)}{dr} \approx a_1 \Delta r + a_2 \Delta r^2 + a_3 \Delta r^3 + a_4 \Delta r^4 \quad (2)$$

где  $\Delta r$  – расстояние между нуклеотидами.

Расстояние между нуклеотидами определяется по формуле:

$$\Delta r = \sqrt{(X_{i+1} - X_i)^2 + (Y_{i+1} - Y_i)^2 + (Z_{i+1} - Z_i)^2}$$

<sup>1</sup> Работа выполнена по заказу Научно-производственного предприятия «Кама ВТ»

где  $X_i, Y_i, Z_i$  – координаты  $i$ -нуклеотида в трехмерном пространстве,  $X_{i+1}, Y_{i+1}, Z_{i+1}$  – координаты  $i+1$ -нуклеотида в трехмерном пространстве.

Если расстояние между нуклеотидами превышает расстояние  $r_w$  то взаимодействие между этими молекулами не учитывается.

Коэффициенты  $a_i$  были определены методом минимизации квадрата отклонений между экспериментальными данными и аппроксимирующей функцией.

На рисунке 1 представлен график силы взаимодействия между нуклеотидами от расстояния между ними.

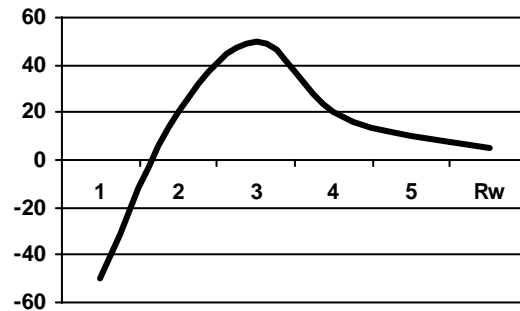


Рис. 1 - Сила взаимодействия F

Для каждого элемента на спирали ДНК можно составить три дифференциальных уравнения:

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 x_i}{dt_2} &= \sum_{i=1}^n F_x \\ m \frac{d^2 y_i}{dt_2} &= \sum_{i=1}^n F_y \\ m \frac{d^2 z_i}{dt_2} &= \sum_{i=1}^n F_z \end{aligned} \quad (3)$$

где  $F_x, F_y, F_z$  - проекции сил взаимодействия между  $i$  нуклеотидом и остальными на оси  $x, y$  и  $z$ ;  $m$  – масса нуклеотида

Проекции находятся по формулам

$$\begin{aligned} F_x &= F \cdot \cos \alpha \\ F_y &= F \cdot \cos \beta \\ F_z &= F \cdot \cos \delta \end{aligned} \quad (4)$$

где  $F$  – сила взаимодействия между  $i$  и  $i+1$  нуклеотидами,  $\alpha, \beta, \delta$  - углы между вектором силы  $F$  и плоскостями  $X, Y, Z$  соответственно.

В системе уравнений 3 находили ускорение - вторая производная координаты по времени.

Находим новые координаты каждого нуклеотида по формулам:

$$\begin{aligned} X_i' &= X_i + v_x' \cdot t \\ Y_i' &= Y_i + v_y' \cdot t \\ Z_i' &= Z_i + v_z' \cdot t \end{aligned} \quad (5)$$

где  $X_i', Y_i', Z_i'$  – новые координаты  $i$ -нуклеотида

$X_i, Y_i, Z_i$  – предыдущие координаты  $i$ -нуклеотида

$v_x', v_y', v_z'$  – новые значения проекции скорости на плоскости  $X, Y, Z$   $i$ -нуклеотида

$t$  – очень малый промежуток времени.

Проекция скорости определяются по формулам :

$$\begin{aligned} v_x' &= v_x + a_x' \cdot t \\ v_y' &= v_y + a_y' \cdot t \\ v_z' &= v_z + a_z' \cdot t \end{aligned} \quad (6)$$

где  $v_x, v_y, v_z$  – предыдущие значения проекции скорости на плоскости  $X, Y, Z$   $i$ -нуклеотида;

$a_x', a_y', a_z'$  – новые значения проекции ускорения на плоскости  $X, Y, Z$   $i$ -нуклеотида.

Молекула ДНК будет находиться в устойчивом состоянии, когда ускорение каждого нуклеотида равно нулю [2].

Для моделирования альфа-частицы необходимо задать ее массу и направление движения.

Второй этап - моделирование взаимодействия молекулы ДНК, а именно нуклеотида молекулы с альфа частицей. Задаем модуль скорости альфа частицы. По ее модулю несложно найти три проекции вектора скорости на координатную плоскость аналогично формулам (4). И затем переходим снова к формулам (5).

Результат взаимодействия может быть различным. В зависимости от скорости альфа частицы после ее столкновения с нуклеотидом:

- ДНК возможно подвергнется незначительным изменениям, но не разрушится ее спиралевидная структура;
- разрушится спиралевидная структура молекулы ДНК [3].

### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанная математическая модель взаимодействия молекулы ДНК с альфа частицами позволяет определить, при какой кинетической энергии альфа частицы происходит разрушение молекулы ДНК.

Использование пакета 3D Studio MAX [4] позволяет получить визуальную интерпретацию данного процесса, что позволяет ученым биологам представить как процессы взаимодействия молекулы ДНК с альфа частицами, так и взаимодействие молекул ДНК между собой [5].

Разработанная программа может быть использована для работы лаборатории физики и микробиологии по изучению влияния радиоактивных излучений на клетки организма, и непосредственно ДНК.

**Литература**

1. *Еременко Т., Тимофеева М.* Организация, изменения и воспроизведение генома человека. - М: Медицина, 1980.
2. *Дубинин Н.П.* Молекулярная генетика и действие излучений на наследственность. - М.: Гос. изд-во лит. по атом. науке и технике, 1973. - 240 с.
3. *Рябченко Н.И.* Радиация и ДНК. - М.: Атомиздат, 1979. - 191с.
4. MAXScript для 3dMAX 7.0: Электронная справка.
5. Bicalho A., Feltman S. MAXScript & the SDK for 3D Studio MAX. - SYBEX Inc., 2000. - 450с.

**Крейле Ирина Владиславовна**

Студентка электротехнического факультета  
Белорусско-Российский университет, г. Могилев  
Тел.: +375(222) 46-85-65  
E-mail: [ira\\_bareika@tut.by](mailto:ira_bareika@tut.by)

**Щербо Наталья Михайловна**

Старший преподаватель кафедры АСУ  
Белорусско-Российский университет, г. Могилев  
Тел.: +375(222) 25-63-57