

The Existence and Stability of Discrete Breathers in Peyrard-Bishop DNA Model*

Binbin Lv¹, Weiming Ye², Qiang Tian³

¹National Engineering Research Center for Rare Earth Materials, Grirem Advanced Materials Co., Ltd., General Research Institute for Nonferrous Metals, Beijing

²Department of Systems Science, School of Management and Center for Complexity Research, Beijing Normal University, Beijing

³Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing
Email: {lbbsuccess, qtianbnu}@126.com

Received: May 30th, 2012; revised: Jun. 7th, 2012; accepted: Jun. 10th, 2012

Abstract: The existence of discrete breathers in Peyrard-Bishop DNA model is proved by using rotating wave approximation, local anharmonic approximation and numerical calculation. At the same time, the linear stability of discrete breathers is investigated in this model by using Floquet analysis. The stability, localization and amplitude of discrete breathers in Peyrard-Bishop DNA model correlate closely to system nonlinear effect.

Keywords: Peyrard-Bishop DNA Model; Discrete Breathers; Nonlinear Effect

Peyrard-Bishop DNA 模型中分立呼吸子的存在与稳定性分析*

吕彬彬¹, 叶纬明², 田强³

¹北京有色金属研究总院稀土材料国家工程研究中心, 有研稀土新材料股份有限公司, 北京

²北京师范大学管理学院复杂网络研究中心, 系统科学系, 北京

³北京师范大学物理系, 北京

Email: {lbbsuccess, qtianbnu}@126.com

收稿日期: 2012年5月30日; 修回日期: 2012年6月7日; 录用日期: 2012年6月10日

摘要: 本文通过局域非简谐近似、旋转波近似和数值方法证明了 Peyrard-Bishop DNA 模型中存在分立呼吸子, 通过弗洛开单位圆的稳定性分析方法讨论了模型中存在的分立呼吸子的稳定性问题, 得到分立呼吸子的稳定性、局域性及振幅均与模型中非线性作用的大小有关。

关键词: Peyrard-Bishop DNA 模型; 分立呼吸子; 非线性作用

1. 引言

在 DNA 分子双螺旋结构被发现的五十多年里, 对其性质的研究一直吸引着众多的物理学家和生物学家, 他们都试图揭开这个生命密码的神秘面纱。过去的几十年里, 大量关于 DNA 双原子链的模型已被提出^[1], 科学家们分别从生物、物理、化学等不同角度对 DNA 分子进行研究。然而 DNA 静态的生物分子结构不足以充分地解释其功能, (例如: 读取基因码或

者复制等)因此研究 DNA 分子的动力学性质变得非常重要。由于涉及到大振幅振动, 所以其非线性作用是不可忽略的, 这一点也使得 DNA 分子的动力学研究变得更加有趣。DNA 分子链中的非线性激发——分立呼吸子和扭结孤子的动力学特性吸引了很多生物物理学家和非线性科学研究者的目光^[2], 生物体中的非线性激发(DNA 分子、蛋白质等)在文献^[3,4]中得到了广泛的讨论, 非线性激发——分立呼吸子在理论方面的研究已经得到一些有意义的结果^[5,6], 与此同时分立

*资助信息: 国家自然科学基金项目(NO.10975015)的资助。

呼吸子的动力学特性与带隙间的分立呼吸子特性非常相似，对于带隙分立呼吸子的动力学特性已被田强和徐权教授等人详细研究过^[7-11]。近来，分立呼吸子的研究在实验方面也取得了较大进展，如在非线性光晶格，超导约瑟夫森结^[12]等模型中。目前，两种 DNA 模型已被非线性物理学家广泛研究，一种是 Peyrard and Bishop (PB)——DNA 模型^[13]另一种是 Yakushevich——DNA 模型^[14]。

2. Peyrard-Bishop DNA 模型

构成生物体最主要的两类化合物是蛋白质和核酸，而构成蛋白质所需要的基因密码全部储存在 DNA 分子链中，大量实验表明每一个染色体都是由单个的 DNA 分子构成，大约 4~10 cm 长。DNA 分子是一个聚合物，更精确地说是一个相互耦合的聚合物，其双螺旋结构由沃森和克里克提出，结构图形如图 1 所示^[15]。

组成这个聚合体的每一个单体叫做核苷酸，图 2

中给出了核苷酸的示意图^[15]。

每一个核苷酸的糖类和磷酸盐部分都是相同的，只是四种基底不同。它们分别是：adenine(A), guanine(G), cytosine(C), thymine(T)。这四个基底通过氢键成对耦合，每一对都是由嘌呤和嘧啶构成，大小几乎相等结构也很规则，其结构如图 3 所示。

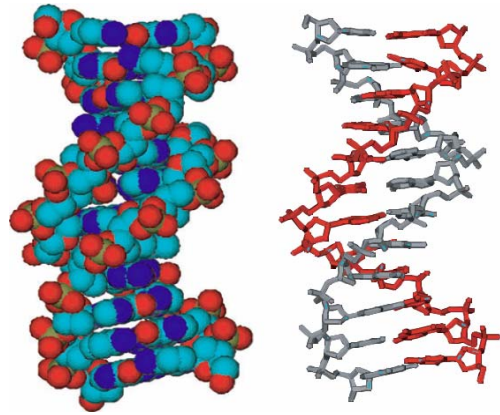


Figure 1. The space image of DNA double helix
图 1. DNA 双螺旋的空间图

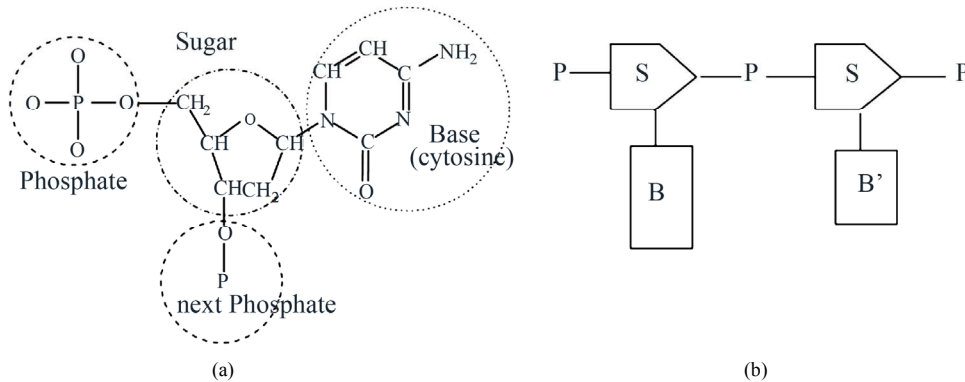


Figure 2. The structure image of a molecule of DNA nucleotide
图 2. DNA 分子中核苷酸分子的结构示意图

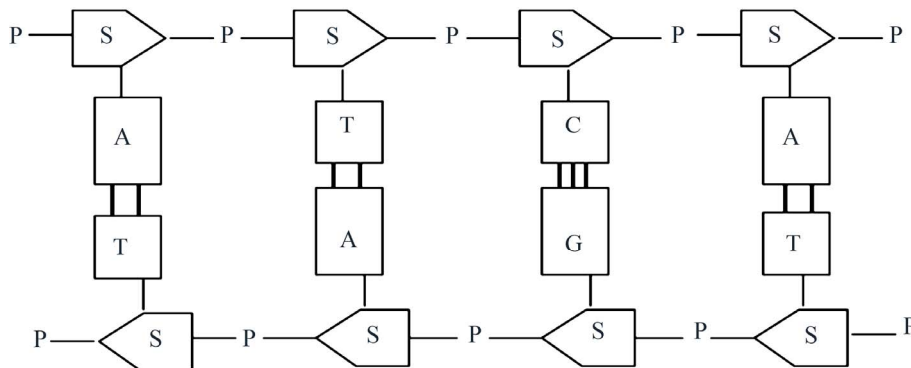


Figure 3. The image of two nucleotide molecules through hydrogen bonds connecting
图 3. 两个核苷酸分子通过氢键连接的图像

为了研究这两个相互连接的链形成双螺旋结构的原因,我们就必须考虑组成这些核苷酸之间的相互作用,本质上来讲有两种力稳定了这种双螺旋结构:

1) 存在于互补基之间的氢键作用: 仅有两种基底对是被允许的,一种是 A-T 对,它们之间有两个氢键;另一种是 G-C 对,它们之间有三对氢键。典型的共价键如 C-C 键,长度大约为 1.54 Å,键能为 3.6 eV,通过施加 0.14 eV 的能量可将键长拉长 0.1 Å。相比而言,O-H 键之间的长度为 2.75 Å,能量键为 0.13~0.26 eV,施加 0.004 eV 的能量就可以将键长拉长 0.1 Å。

2) 存在于基底之间的叠置相互作用: 叠置能量的大小取决于基底的顺序,量子化学已经可以计算出不同基底配对后的能量。

为了探测 DNA 分子的非线性动力学特性,人们需要精确的数据去建立一个有意义的模型。本文中主要考虑 DNA 分子的非线性动力学性质,DNA 分子的特性在于它能够稳定地存储基因信息,为了更好的地阅读这些信息,我们就有必要分析大振幅的非线性振动,因此建立的模型要能够描述这些特性。有学者认为原子量级的模型会更好、更精确些^[16],因为它可以描述整个原子团的动力学性质,但这样的模型在实际数值模拟时存在很大弊端,工作量过于庞大,且从模拟数据中抽取与实验相吻合的数据也很困难,所以我们要选取中等尺度大小的模型且在参数的选取上要与可控的实验中得到的参数相吻合。每个基底仅选一个自由度,并要使用一个真实的变量,它可以描述基底连接键之间的作用力。我们定义 y_n 为描述第 n 对基底的实变量,模型如图 4 所示。

该模型的哈密顿量为

$$H = \sum_n \frac{p_n^2}{2m} + W(y_n, y_{n-1}) + V(y_n) \quad (1)$$

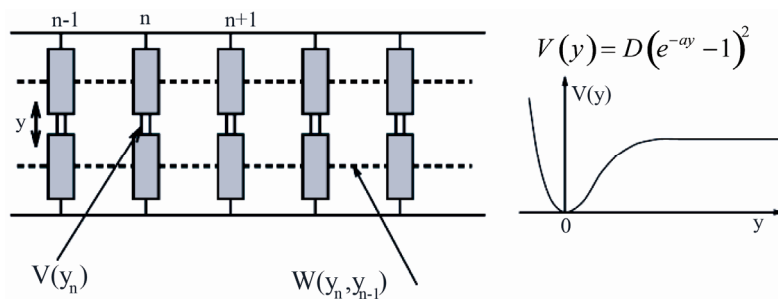


Figure 4. The simple dynamical model for DNA nonlinear dynamics
图 4. 简单 DNA 分子非线性动力学模型

m 表示基底的质量,假定所有基底的质量 m 是相同的,势能 $V(y)$ 描述两个基底间的相互作用,我们用 Morse 势来表示。

$$V(y) = D(\exp^{-ay} - 1)^2 \quad (2)$$

选择 Morse 势的原因在于该势能可以对生物体化学键进行很好的描述,其中 D 代表每一对基底的离解能, a 代表同质逆长度参数,用于设定势能的空间尺度。当 $y < 0$ 时,势能项表示一种很强的排斥作用,对应于原子空间排列受阻;当 $y = 0$ 时,势能存在最小值;通过该势能描述还可得到当碱基对相距很远时,存在于碱基对之间的相互作用力就会消失,如果不选 Morse 势,这一特性就无法体现。 $W(y_n, y_{n-1})$ 描述的是相邻碱基对之间的相互作用,当 $y_n = y_{n-1}$ 时 $W(y_n, y_{n-1})$ 会得到最小值,其形式如下:

$$W(y_n, y_{n-1}) = \frac{1}{2} k (y_n - y_{n-1})^2 \quad (3)$$

如果碱基对之间的叠置作用很强,则可以一直保持 y_n 靠近于 y_{n-1} 。对于真实的 DNA 模型并不总能满足这种相互作用关系,然而这种简谐近似的相互作用在简化计算的同时能与很多实验结论相吻合,并得到很多有意义的结果。出于计算方便首先进行无量纲转换,令 $Y = ay$, $H' = H/D$, 并定义 $\mu = k/(Da^2)$ 和 $\tau = (Da^2/mt)^{1/2}$, 得到变换后的哈密顿量为

$$H' = \sum_n \frac{1}{2} P_n^2 + \frac{1}{2} \mu (Y_n - Y_{n-1})^2 + (\exp^{-Y_n} - 1)^2 \quad (4)$$

无量纲化的运动方程仅依赖于参数 μ , 形式如下:

$$\ddot{Y}_n = \mu (Y_{n+1} + Y_{n-1} - 2Y_n) + 2 \exp^{-Y_n} (\exp^{-Y_n} - 1) \quad (5)$$

上式代表一组耦合的非线性微分方程,对此很难得到精确的解析解,我们运用数值方法来求解该运动方程组的数值解。

3. 分立呼吸子的存在

本节我们主要探讨 Peyrard-Bishop DNA 模型中能量信息传输单元——分立呼吸子的存在, 根据分立呼吸子的定义可知其满足空间局域性和时间周期性的条件, 可以采取试探解的方法, 设其具有如下解的形式

$$Y_i(\tau) = u_i G(\tau) \quad (i = 1, 2, 3, \dots, n) \quad (6)$$

式中 u_i 表示分立呼吸子空间部分, $G(\tau)$ 表示时间周期的部分。我们运用局域非简谐近似和旋转波近似, 设 $G(\tau) = \cos \omega_b \tau$, 由此解 $Y_i(\tau)$ 被写为 $Y_i(\tau) = u_i \cos \omega_b \tau$, 其中 ω_b 表示呼吸子的频率。将(6)式代入(5)式得到

$$\ddot{u}_i = \mu(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i) - 2\left(u_i - \frac{3}{2}u_i^2 + \frac{7}{6}u_i^3\right) \quad (7)$$

上述方程有很多局域和非局域的非线性解, 很明显由分立呼吸子的定义可知, 前者为呼吸子解。下面我们讨论该 DNA 模型中三类特殊的分立呼吸子解^[17]:

1) 对称分立呼吸子 (Sievers-Takeno mode)

$$u = \{\dots, v_3, v_2, v_1, 1, v_1, v_2, v_3, \dots\}; \quad (8)$$

2) 反对称分立呼吸子 (Page mode)

$$u = \{\dots, -v_3, -v_2, -v_1, -1, v_1, v_2, v_3, \dots\}; \quad (9)$$

3) 多位对称分立呼吸子 (Symmetric multi-breather)

$$u = \{\dots, v_3, v_2, v_1, 1, 1, v_1, v_2, v_3, \dots\}; \quad (10)$$

方程(7)会得到很多不同的解, 考虑到我们求解分立呼吸子空间局域的条件限制, 方程(8)~(10)中的变量满足 $|v_{i+1}| < |v_i| < 1$ 。通过数值计算, 我们在得到 Peyrard-Bishop DNA 模型中存在三类特殊分立呼吸子解的同时, 还得到不同强度的非线性作用下该模型中分立呼吸子动力学特性的变化。

从图 5(a)和 5(b)中可知 Peyrard-Bishop DNA 模型中确实存在对称分立呼吸子和反对称分立呼吸子, 图 5(c)显示当系统的非线性作用增强(即非线性参数 μ 增大时), 分立呼吸子变得更加局域化了, 同时振幅的幅度也大大增加; 图 5(d)给出了稳定存在的分立呼吸子随时间周期演化的图像; 但对于该模型而言系统的非线性作用强度存在一个临界的 μ_c 值, 当非线性作用的强度超过阈值 μ_c 时, 呼吸子很快就崩塌, 成为图 5(e)

所示的图像, 此时呼吸子已经衰变不再稳定; 图 5(f)给出了稳定存在的多位对称分立呼吸子的空间变化图像。

4. 分立呼吸子的稳定性分析

非线性模型中分立呼吸子的稳定性问题已在很多文章中进行过讨论^[5,18]。本文主要考虑四组典型不同强度的非线性作用(即参数 $\mu = 0.1$, $\mu = 1$, $\mu = 2$, $\mu = 10$), 并在四种情况下讨论分立呼吸子解的稳定性。我们采用弗洛开(Floquet)单位圆的稳定性分析方法, 首先在系统的非线性作用强度 μ 较小时, 计算得到本征值全部位于单位圆上, 如图 6(a)所示, 随着非线性作用 μ 的增强, 各解的本征值在单位圆上开始扩散, 一直到达+1, 如图 6(b)(c)所示。图 6(c)中本征值到达+1 意味着分立呼吸子的频率已经达到声学支, 要想得到稳定的分立呼吸子非线性作用 μ 必须为小值, 因此系统内非线性作用强度存在一个阈值 μ_c , 当 $\mu > \mu_c$ 时解的本征值不再是全部分布在单位圆上, 而会有本征值对称地分布在圆的内外两侧, 如图 6(d)所示, 此时代表分立呼吸子已不再稳定。

从上面稳定性的图像可以得出, 模型中非线性作用参数 μ 对分立呼吸子的局域性与稳定性有着重要的影响。因为只有稳定的分立呼吸子才能在实际应用中得到实现, 我们通过弗洛开单位圆分析法求得只有当非线性作用参数 $\mu < \mu_c$ 时才会有稳定的呼吸子存在, 它的存在对系统能量、信息的传输起着非常重要的作用。

5. 结论

本文主要研究了 Peyrard-Bishop DNA 模型中对称分立呼吸子、反对称分立呼吸子、多位对称分立呼吸子的存在性及稳定性方面的问题。该模型涵盖了许多一维分立单原子体系, 因此由本文模型得到的结果具有普适性也可应用到其他类似模型中。首先我们引进一个典型的 Peyrard-Bishop DNA 模型, 通过局域非简谐近似、旋转波近似和数值方法求出该模型中存在三类特殊的分立呼吸子解, 其中非线性作用强度对三类呼吸子的局域性和振幅都有很大影响。对于具有在位势和相互作用势的 Peyrard-Bishop DNA 模型中非线性作用强度对各类呼吸子的稳定性有着重要的

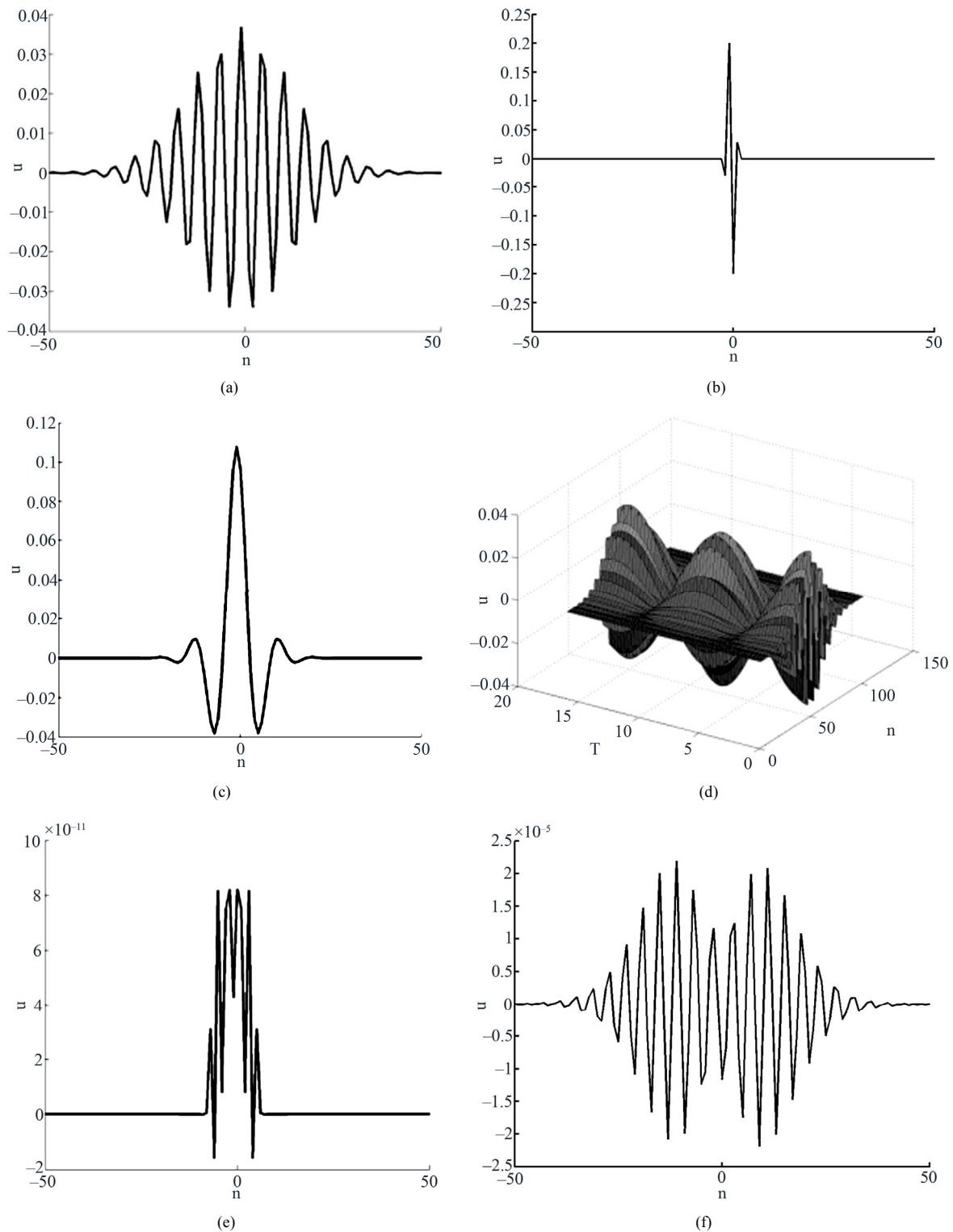


Figure 5. Graphical illustration of the profiles of the discrete breathers (DBs) in DNA model: (a) The symmetric DBs are obtained numerically with $\omega = 1.2, \mu = 0.1$; (b) The anti-symmetric DBs are obtained numerically with $\omega = 1.2, \mu = 0.1$; (c) The symmetric DBs are obtained numerically with $\omega = 1.2, \mu = 1$; (d) The evolution of symmetric DBs with time τ ; (e) The DBs decay with $\omega = 1.2, \mu = 10$; (f) The multi-site DBs with $\omega = 1.2, \mu = 0.1$

图 5. 模型中分立呼吸子的变化图像: (a) 当 $\omega = 1.2, \mu = 0.1$ 时对称分立呼吸子的形状; (b) 当 $\omega = 1.2, \mu = 0.1$ 时反对称分立呼吸子的形状; (c) 当 $\omega = 1.2, \mu = 1$ 时对称分立呼吸子的形状; (d) 对称分立呼吸子随时间的演化图像; (e) 分立呼吸子崩塌 $\omega = 1.2, \mu = 10$; (f) 当 $\omega = 1.2, \mu = 0.1$ 时多位对称分立呼吸子的形状

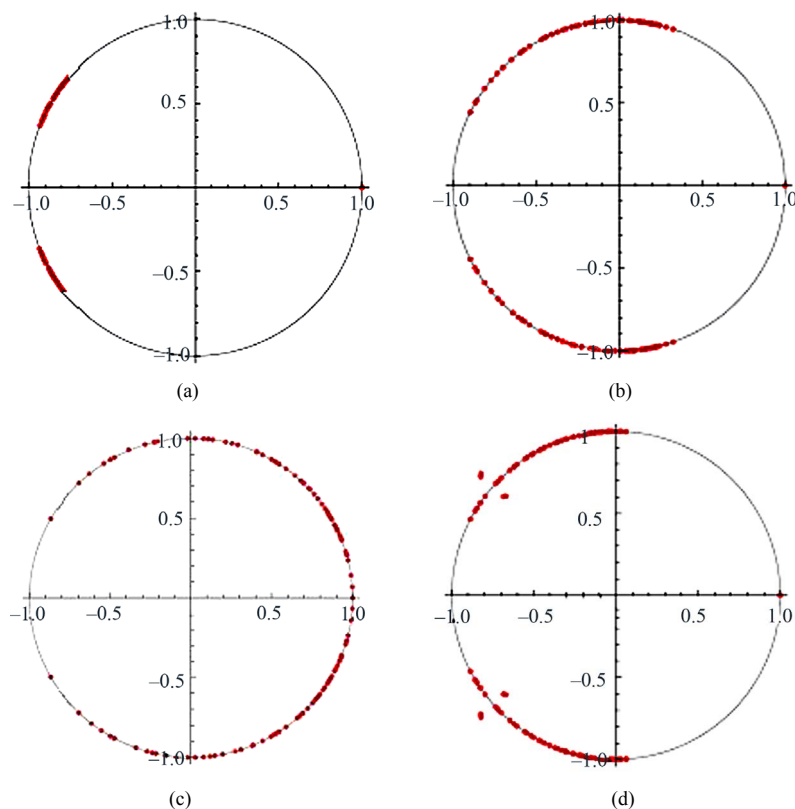


Figure 6. The distribution of the Floquet multipliers corresponding to the breather for increasing values of nonlinear parameters μ
 图 6. 随着非线性作用参数 μ 不断增大, 分立呼吸子对应的弗洛开乘子的分布

影响, 当非线性作用较弱时, 各类分立呼吸子能够稳定存在; 如果非线性作用较强超过临界阈值, 分立呼吸子将会崩塌; 其中, 阈值 μ_c 的大小与模型势能参数最初的设定值有关, 因此稳定的分立呼吸子只能存在于弱非线性性的 Peyrard-Bishop DNA 模型中。

6. 致谢

本文感谢国家自然科学基金项目(10975015)的资助。

参考文献 (References)

[1] F. Zhang, M. A. Collins. Model simulations of DNA dynamics. *Physical Review E*, 1995, 52(4): 4217-4224.
 [2] A. S. Davydov. *Solitons in molecular systems*. Boston: Kluwer Dordrecht, 1981.
 [3] E. Z. Sillero, A. V. Shapovalov and F. J. Esteban. Formation, control, and dynamics of N localized structures in the Peyrard-Bishop model. *Physical Review E*, 2007, 76(6): Article ID: 066603.
 [4] L. I. Yakushevich, A. V. Savin and L. I. Manevitch. Nonlinear dynamics of topological solitons in DNA. *Physical Review E*, 2002, 66(1): Article ID: 016614.
 [5] S. Flach, C. R. Willis. Discrete breathers. *Physics Reports*, 1998, 295: 181-264.
 [6] B. B. Lv, Y. P. Deng and Q. Tian. Discrete breathers in a model

with Morse potentials. *Chinese Physics B*, 2010, 19(2): Article ID: 026302.
 [7] Q. Xu, Q. Tian. Periodic, quasiperiodic and chaotic discrete breathers in a parametrical driven two-dimensional discrete Klein-Gordon lattice. *Chinese Physics Letters*, 2009, 26(4): Article ID: 040501.
 [8] B. B. Lv, Q. Tian. Discrete gap breathers in a two-dimensional diatomic face-centered square lattice. *Chinese Physics B*, 2009, 18(10): 4393-4406.
 [9] B. B. Lv, Q. Tian. Different kinds of discrete breathers in three types of one-dimensional models. *Communications in Theoretical Physics*, 2010, 54(4): 728.
 [10] B. B. Lv, Q. Tian. Discrete breathers in a two-dimensional Morse lattice with an on-site harmonic potential. *Frontiers of Physics*, 2009, 4(4): 497-504.
 [11] B. B. Lv, Q. Tian. Different kinds of discrete breathers in a Sine-Gordon lattice. *Frontiers of Physics*, 2010, 5(2): 199-204.
 [12] P. Binder, D. Abraimov, A. V. Ustinov, S. Flach and Y. Zolotareyuk. Observation of breathers in Josephson ladders. *Physical Review Letters*, 2000, 84(4): 745-748.
 [13] M. Peyrard, A. R. Bishop. Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation. *Physical Review Letters*, 1989, 62(23): 2755-2758.
 [14] L. V. Yakushevich. Nonlinear DNA dynamics: A new model. *Physics Letters A*, 1989, 136(7-8): 413-417.
 [15] M. Peyrard. Nonlinear dynamics and statistical physics of DNA. *Nonlinearity*, 2004, 17: R1-R40.
 [16] T. Dauxois, N. Theodorakopoulos and M. Peyrard. Thermodynamic instabilities in one dimension: Correlations, scaling and solitons. *Journal of Statistical Physics*, 2002, 107(3-4): 869-91.
 [17] A. J. Sievers, S. Takeno. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals. *Physical Review Letters*, 1988, 61(8): 970-973.
 [18] S. Aubry. Breathers in nonlinear lattices: Existence, linear stability and quantization. *Physica D*, 1997, 103(1): 201-250.