

Universidade Federal de Juiz de Fora  
Instituto de Ciências Exatas  
Programa de Pós-Graduação em Física

**Franciele Oliveira Teixeira**

**Método das Coordenadas Coletivas Aplicado ao Modelo de Peyrard-Bishop  
para o DNA**

Juiz de Fora

2022

Franciele Oliveira Teixeira

Método das Coordenadas Coletivas Aplicado ao Modelo de Peyrard-Bishop  
para o DNA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Juiz de Fora, na área de concentração em Física, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Albert Carlo Rodrigues Mendes

Juiz de Fora

2022

Ficha catalográfica elaborada através do Modelo Latex do CDC da UFJF  
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Oliveira Teixeira, Franciele.

Método das Coordenadas Coletivas Aplicado ao Modelo de Peyrard-Bishop para o DNA / Franciele Oliveira Teixeira. – 2022.

47 f. : il.

Orientador: Prof. Dr. Albert Carlo Rodrigues Mendes  
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Física, 2022.

1. DNA... I. Carlo Rodrigues Mendes, Albert, orient. II. Título.

Franciele Oliveira Teixeira

**"Método das Coordenadas Coletivas Aplicado ao Modelo de Peyrard-Bishop para o DNA"**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Física. Área de concentração: Física.

Aprovada em 29 de abril de 2022.

BANCA EXAMINADORA

**Prof. Dr. Albert Carlo Rodrigues Mendes** - Orientador

Universidade Federal de Juiz de Fora

**Prof. Dr. Vahid Nikoofard**

Universidade do Estado do Rio de Janeiro

**Prof. Dr. Jorge Ananias Neto**

Universidade Federal de Juiz de Fora

Juiz de Fora, 26/04/2022.



Documento assinado eletronicamente por **Albert Carlo Rodrigues Mendes, Professor(a)**, em 29/04/2022, às 17:07, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Vahid Nikoofard, Usuário Externo**, em 29/04/2022, às 19:55, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).

---



Documento assinado eletronicamente por **Jorge Ananias Neto, Professor(a)**, em 29/04/2022, às 21:55, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).

---



A autenticidade deste documento pode ser conferida no Portal do SEI-Uffj ([www2.uffj.br/SEI](http://www2.uffj.br/SEI)) através do ícone Conferência de Documentos, informando o código verificador **0753252** e o código CRC **D51DD91E**.

---

*Dedico este trabalho a minha Mãe (In Memoriam.)*

## AGRADECIMENTOS

Um trabalho de mestrado é uma longa trajetória permeada por inúmeros desafios e trilhar este caminho só foi possível com o apoio de pessoas especiais, que tem minha eterna gratidão por me apoiarem neste projeto.

Primeiramente, agradeço a Deus, já que Ele colocou pessoas tão especiais ao meu lado, sem as quais certamente não teria dado conta!

Agradeço ao meu orientador Albert Mendes por me orientar, por sempre estar disponível e pela confiança depositada em mim mesmo após um período afastada devido ao meu trabalho na Marinha.

Agradeço a CAPES por financiar este projeto e ao Departamento de Física da Universidade Federal de Juiz de Fora por abrir as portas para que este sonho fosse concretizado.

Agradeço e dedico este trabalho a minha Mãe (In Memoriam), sei o quanto ela estaria orgulhosa de me ver chegar até aqui. Ela sempre acreditou no meu potencial, sempre dizia o quanto eu amava escolher as coisas mais difíceis e, hoje, com toda saudade que há em mim dedico a ela. Agradeço ao meu Pai pelo seu infinito apoio, pelas palavras incentivadoras e por sempre acreditar em mim. Agradeço ao meu irmão João Paulo por ser meu braço direito, por estar comigo em todos os momentos. Agradeço ao meu filho, meu pequeno Lucca, por ser minha fonte inspiradora em querer ser e dar a minha melhor versão.

Aos meus amigos, Aruã Aguiar e Thales Faraco, que sempre estiveram juntos comigo desde a época da graduação, minha eterna gratidão por me incentivarem a ir além. Muito obrigada por todo apoio nessa trajetória, por pegarem na minha mão e caminhar em busca desse sonho comigo.

Às minhas amigas Rafaela, Tamires, Patrícia e Rebecca por sempre acreditarem e vibrarem tanto por mim. Em especial as amigas, Vilma e Lidia, que me ajudaram muito com o meu bebê, e dedicaram um tempo especial para cuidar do que eu tenho de mais precioso.

Agradeço à minha Avó Célia por todas suas incansáveis orações!

Ninguém vence sozinho, por isso tenho um coração grato a todos que me apoiaram.

## RESUMO

Neste trabalho, considera-se a molécula de DNA como um sistema dinâmico não-linear onde excitações tipo sólitons estão presentes. O estudo é baseado no modelo de Peyrard-Bishop (PB) para a dinâmica do DNA, o qual leva em conta a interação com os vizinhos na sua estrutura. Aplica-se, então, o método de coordenadas coletivas para tratar corretamente os modos de frequência zero e deduzir uma Hamiltoniana quântica geral para o sistema que contenha um termo do tipo partícula livre associado ao movimento do centro do sóliton e um termo correspondente a um conjunto de osciladores desacoplados.

Palavras-chave: DNA. Não-Linear. Sólitons. Peyrard-Bishop. Coordenadas Coletivas.



## ABSTRACT

In this work, the DNA molecule is considered to be a nonlinear dynamic system where soliton-type excitations are present. The study is based on the Peyrard-Bishop (PB) model for DNA dynamics, which takes into account the interaction with neighbors in its structure. Then, the collective coordinates method is applied to correctly handle zero-frequency modes and deduce a general quantum Hamiltonian for the system that contains a free particle term associated with the motion of the soliton center and a term corresponding to a set of decoupled oscillators.

Keywords: DNA. Nonlinear. Solitons. Peyrard-Bishop. Collective Coordinates.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Retrospectiva histórica sobre a descoberta do DNA e de sua estrutura. . . . .	11
Figura 2 – Foto em cristalografia de uma molécula de DNA <sup>[23]</sup> . . . . .	12
Figura 3 – Representação esquemática da estrutura de dupla hélice de uma molécula de DNA. . . . .	13
Figura 4 – Representação esquemática da estrutura planificada do DNA e de um nucleotídeo. . . . .	13
Figura 5 – Representação química da estrutura das bases nitrogenadas que compõem a molécula de DNA. . . . .	14
Figura 6 – Representação química da estrutura de um nucleotídeo cuja base nitrogenada é a citosina. . . . .	14
Figura 7 – Ligação de hidrogênio entre as bases nitrogenadas. . . . .	15
Figura 8 – Representação esquemática do empilhamento dos platôs de base do DNA, levando em consideração o comprimento das fitas fosfato-pentose: (a) se os platôs forem paralelos entre si, a fita é muito longa para permitir um empilhamento compacto. b) Se os platôs forem rodados um em relação ao outro, o mesmo comprimento de fita permite um empilhamento compacto. . . . .	16
Figura 9 – Representação esquemática das dimensões básicas de uma molécula de DNA. . . . .	16
Figura 10 – Energias para diferentes pares de bases empilhadas. . . . .	17
Figura 11 – Representação esquemática do processo de transcrição. . . . .	18
Figura 12 – Curva de desnaturação de um homopolímero de DNA contendo apenas pares de bases GC. . . . .	18
Figura 13 – Imagem esquemática do processo desnaturação térmica do DNA. . . . .	19
Figura 14 – Representação esquemática do Modelo PB para a dinâmica não-linear do DNA. . . . .	22
Figura 15 – Potencial de Morse. . . . .	23
Figura 16 – Diagrama original de Russel ao estudar o fenômeno dos sólitons <sup>[22]</sup> . . . . .	24
Figura 17 – Representação esquemática da estrutura planificada do RNA e de um nucleotídeo. . . . .	33
Figura 18 – Representação química da estrutura da base nitrogenada uracila. . . . .	33

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO . . . . .</b>	<b>9</b>
<b>2</b>	<b>ESTRUTURA DO DNA . . . . .</b>	<b>11</b>
2.1	Introdução . . . . .	11
2.2	Breve Retrospectiva Histórica . . . . .	11
2.3	Estrutura do DNA . . . . .	12
2.3.1	Estrutura Helicoidal do DNA . . . . .	15
2.4	Leitura do Código Genético . . . . .	17
2.5	Desnaturação Térmica do DNA . . . . .	18
<b>3</b>	<b>MODELO FÍSICO PARA O DNA . . . . .</b>	<b>20</b>
3.1	Introdução . . . . .	20
3.2	O Modelo de Ising para o DNA . . . . .	21
3.3	O Modelo de Peyrard-Bishop (PB) . . . . .	21
<b>4</b>	<b>MÉTODO DAS COORDENADAS COLETIVAS APLICADO AO DNA . . . . .</b>	<b>24</b>
4.1	Introdução . . . . .	24
4.2	Método das Coordenadas Coletivas . . . . .	25
4.2.1	Energia Cinética . . . . .	26
4.2.2	Energia Potencial . . . . .	27
4.2.3	Hamiltoniana Quântica Geral . . . . .	28
<b>5</b>	<b>CONCLUSÃO . . . . .</b>	<b>31</b>
5.1	Perspectivas Futuras . . . . .	32
	<b>APÊNDICE A – Estrutura do RNA . . . . .</b>	<b>33</b>
	<b>APÊNDICE B – Obtenção das Equações (4.6) e (4.7) . . . . .</b>	<b>35</b>
	<b>APÊNDICE C – Obtenção da equação (4.13) . . . . .</b>	<b>37</b>
	<b>APÊNDICE D – Obtenção da Equação (4.15) . . . . .</b>	<b>41</b>
	<b>APÊNDICE E – Obtenção da Equação (4.16) . . . . .</b>	<b>43</b>
	<b>APÊNDICE F – Obtenção da Equação (4.18) . . . . .</b>	<b>44</b>
	<b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>	<b>46</b>

## 1 INTRODUÇÃO

O DNA é uma das moléculas mais interessantes e misteriosas já estudadas. Pertence à classe de biopolímeros e apresenta uma função biológica muito importante, que consiste na capacidade de conservar e transferir informações genéticas. Embora, usualmente, o DNA seja estudado em Biologia, ele não é objeto exclusivo dessa área, uma vez que também levanta questões muito interessantes para a Física e para a Química.

Uma das primeiras tentativas de usar as leis da Física e da Química para analisar fenômenos relacionados ao DNA pode ser encontrada no livro escrito por Erwin Schrödinger intitulado “What is life?” (O que é a vida?)<sup>[1]</sup>. Cinquenta anos após a descoberta da estrutura de dupla hélice do DNA, cientistas e pesquisadores ainda tentam revelar suas propriedades notáveis como a capacidade de armazenar e transmitir informações genéticas e os movimentos de grande amplitude envolvidos nesses processos.

Os estudos relacionados ao DNA iniciaram-se em 1910, com a Teoria Cromossômica de Herança, desenvolvida por Thomas Morgan<sup>[2]</sup>. A partir dessa data, a comunidade científica começou a estudar os cromossomos com o objetivo de entender sua natureza química e investigar qual material genético o compõe. Em 1944, Oswald Avery e seus colaboradores chegaram à conclusão de que o material genético que forma os cromossomos é o DNA<sup>[3]</sup>. Em 1953, os pesquisadores James Watson e Francis Crick apresentaram ao mundo a estrutura helicoidal da molécula do DNA<sup>[4]</sup>.

Uma molécula de DNA é constituída por duas longas cadeias poliméricas que são formadas por unidades monoméricas chamadas nucleotídeos<sup>[5,6]</sup>. Cada nucleotídeo possui um grupo fosfato, uma pentose e uma base nitrogenada. Os quatro tipos de bases pertencentes ao DNA são: Adenina (A), Citosina (C), Timina (T) e Guanina (G), as quais se reúnem aos pares A-T e C-G. A união dessas cadeias assume uma estrutura de dupla hélice, estabilizada por meio de ligações de hidrogênio entre as bases nitrogenadas e para entender o porquê da formação de uma dupla hélice, tem-se que considerar as interações entre os grupos que compõe os nucleotídeos.

A molécula de DNA pode sofrer grandes alterações conformacionais, como nos processos de transcrição e desnaturação<sup>[7]</sup>. Esses processos evidenciam o fato de a estrutura estática das moléculas biológicas não ser o suficiente para explicar sua função, tendo em vista que as mesmas são um sistema dinâmico com movimentos internos de natureza bem complexa. Além disso, os movimentos que elas realizam desempenham um papel importante no funcionamento da célula.

Os modelos matemáticos de Ising<sup>[7]</sup> e de Peyrard-Bishop<sup>[8–10]</sup> para o DNA servem como um ponto de partida para estabelecer um modelo que descreva as propriedades dessa molécula. Para isso, eles devem estar na escala de entidades básicas que codificam as informações no DNA, isto é, os pares de bases. Na escala dos pares de bases, o modelo

mais simples aplicado é o Modelo de Ising, cujo o estado de um par de base é descrito simplesmente por uma variável de dois estados, sendo 0, se a base está fechada, e, 1 se a base está aberta. Indo mais além, porém mantendo o modelo o mais simples possível, o modelo do tipo Peyrard-Bishop (PB) simplifica a geometria da dupla hélice de DNA assumindo que as duas cadeias entrelaçadas podem ser descritas por uma única cadeia unidimensional. Cada par de base é representado como uma massa pontual nessa cadeia.

O objetivo principal deste trabalho é, partindo do modelo de Peyrard-Bishop para a molécula de DNA, aplicar o método de coordenadas coletivas<sup>[11–16]</sup> para tratar corretamente os modos de frequência zero (que surgem em teorias invariantes por translação) e deduzir uma Hamiltoniana quântica geral para o sistema que contenha um termo do tipo partícula livre (imersa em um banho térmico) associado ao movimento do centro do sóliton<sup>[18,20]</sup> e um termo correspondente a um conjunto de osciladores desacoplados.

## 2 ESTRUTURA DO DNA

### 2.1 Introdução

A síntese das diversas proteínas presentes nos seres vivos tem relação direta com os ácidos nucleicos. Existem dois tipos de ácidos nucleicos: o DNA (ácido desoxirribonucleico) e o RNA (ácido ribonucleico).

O DNA é responsável por armazenar e transmitir informações genéticas, enquanto o RNA efetua o processo de tradução (síntese proteica), orientado pelas informações contidas no DNA.

Uma vez que o comportamento dinâmico do DNA é o objeto de estudo dessa dissertação, o enfoque será dado apenas às suas propriedades<sup>[5,6,19]</sup>. Para mais informações sobre as propriedades do RNA, *vide* Apêndice A.

### 2.2 Breve Retrospectiva Histórica

Apresenta-se na Figura 1 um infográfico com os principais fatos que envolveram a descoberta do DNA e de sua estrutura.



Figura 1 – Retrospectiva histórica sobre a descoberta do DNA e de sua estrutura.

Em 1910, o biólogo Thomas Hunt Morgan concluiu que os genes estão localizados nos cromossomos (Teoria Cromossômica da Herança)<sup>[2]</sup>. A partir de então, a comunidade científica começou a estudar os cromossomos com o objetivo de entender a sua natureza química e foi descoberto que eles são formados por DNA e proteínas.

Alguns anos depois, em 1928, o médico britânico Frederick Griffith desenvolveu os primeiros estudos que consideravam o DNA como material hereditário ao conduzir um

experimento que utilizava a bactéria *Streptococcus pneumoniae* e ratos<sup>[17]</sup>.

Em 1944, o médico e bioquímico Oswald Theodore Avery e seus colaboradores concluíram que o material genético da célula é o DNA<sup>[3]</sup>. A partir de então, começou uma corrida para definir qual seria a estrutura da molécula de DNA e para obter suas propriedades. Dois laboratórios entraram nessa corrida, um nos Estados Unidos (laboratório do químico Linus Pauling) e outro na Inglaterra (laboratório da química Rosalind Franklin).

Somente em 1953, que o biólogo James Watson e o físico Francis Crick apresentaram em um artigo, na revista *Nature*, que a molécula de DNA apresenta estrutura de dupla hélice<sup>[4]</sup>. A descoberta dessa estrutura só foi possível, pois Crick teve acesso a uma foto em cristalografia que se encontrava no laboratório de Rosalind. Essa foto é apresentada na Figura 2.

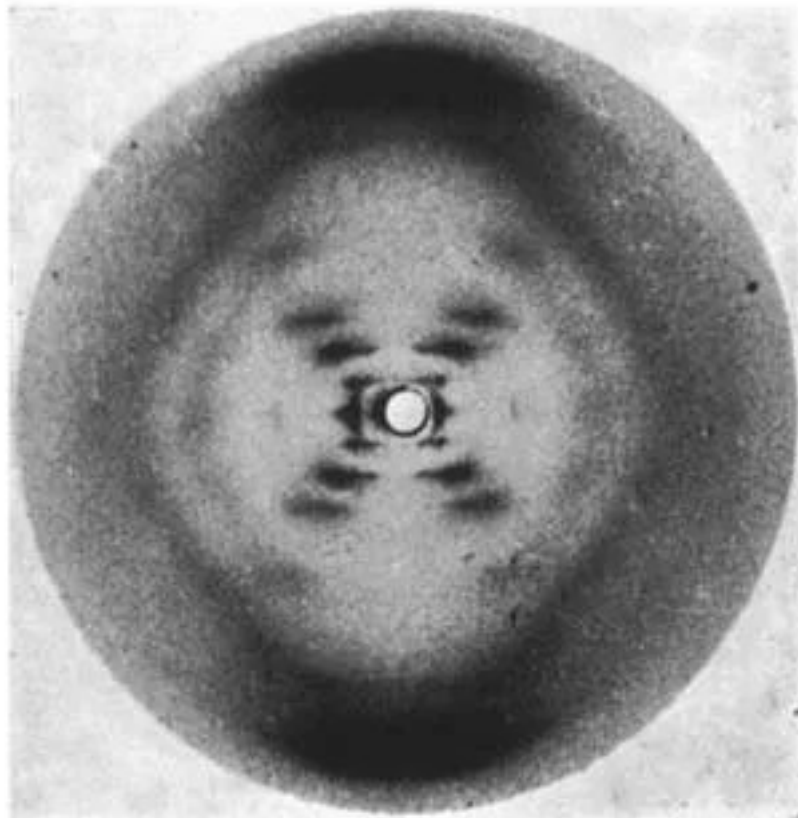


Figura 2 – Foto em cristalografia de uma molécula de DNA<sup>[23]</sup>.

### 2.3 Estrutura do DNA

O DNA é uma molécula helicoidal constituída de dois polímeros que são formados por unidades monoméricas chamadas nucleotídeos. Cada nucleotídeo possui três componentes: um grupo fosfato  $PO_4^-$ , uma pentose (açúcar que recebe o nome de desoxirribose no caso do DNA) e uma base nitrogenada (grupo orgânico que pode ter um ou dois ciclos).

A Figura 3 apresenta uma representação esquemática de uma molécula de DNA helicoidal, enquanto a Figura 4 apresenta uma representação planificada da molécula.

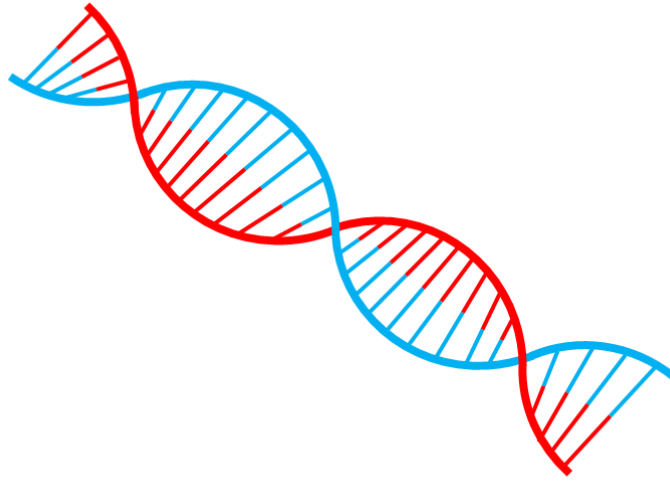


Figura 3 – Representação esquemática da estrutura de dupla hélice de uma molécula de DNA.

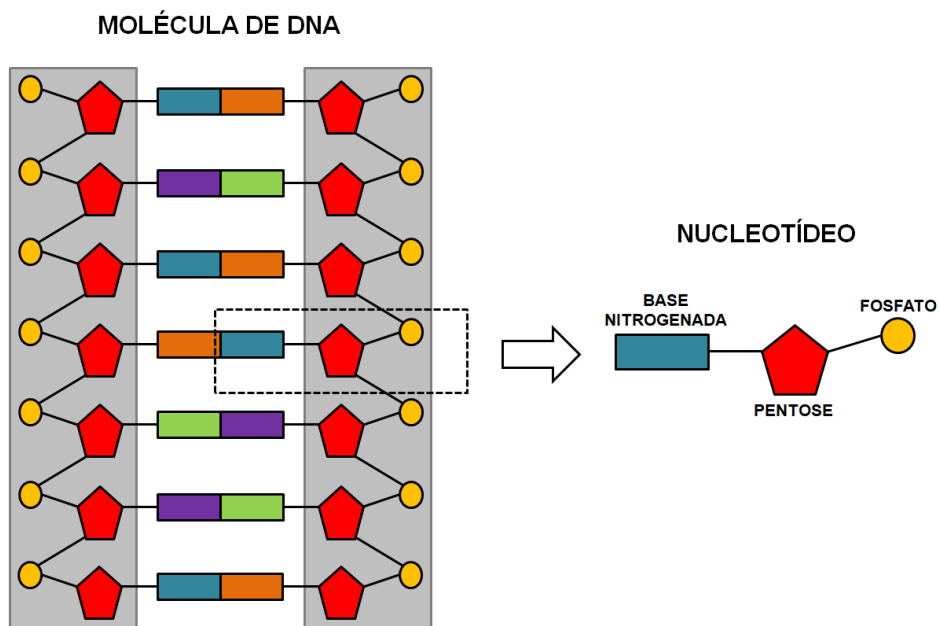


Figura 4 – Representação esquemática da estrutura planificada do DNA e de um nucleotídeo.

Os fosfatos e as pentoses de todos os nucleotídeos são iguais, mas as bases nitrogenadas podem ser diferentes. Existem quatro tipos de bases nitrogenadas, pertencentes a duas categorias:

- Purinas: adenina (A) e guanina (G), com dois ciclos orgânicos.
- Pirimidinas: citosina (C) e timina (T), com um ciclo orgânico.



A Figura 5 mostra a estrutura química dos quatro tipos de bases nitrogenadas, enquanto a Figura 6 exemplifica a estrutura de um nucleotídeo cuja base nitrogenada é a citosina.

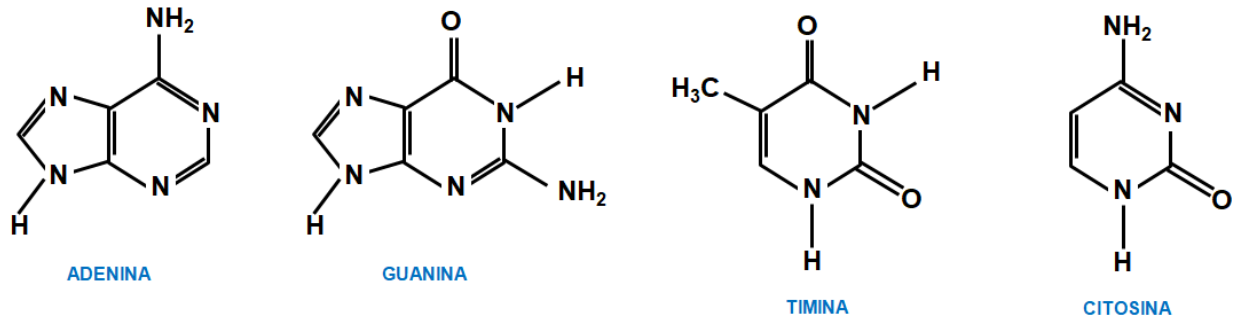


Figura 5 – Representação química da estrutura das bases nitrogenadas que compõe a molécula de DNA.

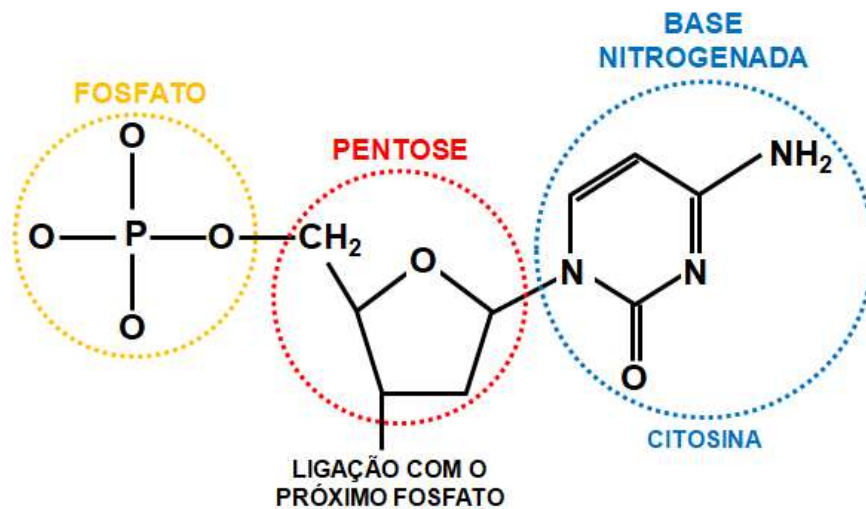


Figura 6 – Representação química da estrutura de um nucleotídeo cuja base nitrogenada é a citosina.

As bases nitrogenadas tendem a se reunir em pares, por meio de ligações de hidrogênio. Elas se unem da seguinte forma: adenina com timina (A-T) e citosina com guanina (C-G), como mostrado na Figura 7.

Vale ressaltar que além do DNA e do RNA desempenharem diferentes funções, existem diferenças estruturais entre eles. O RNA é constituído de apenas um polímero (também formado por nucleotídeos), a pentose que constitui esses nucleotídeos é a ribose e a base nitrogenada uracila (U) substitui a timina (T).

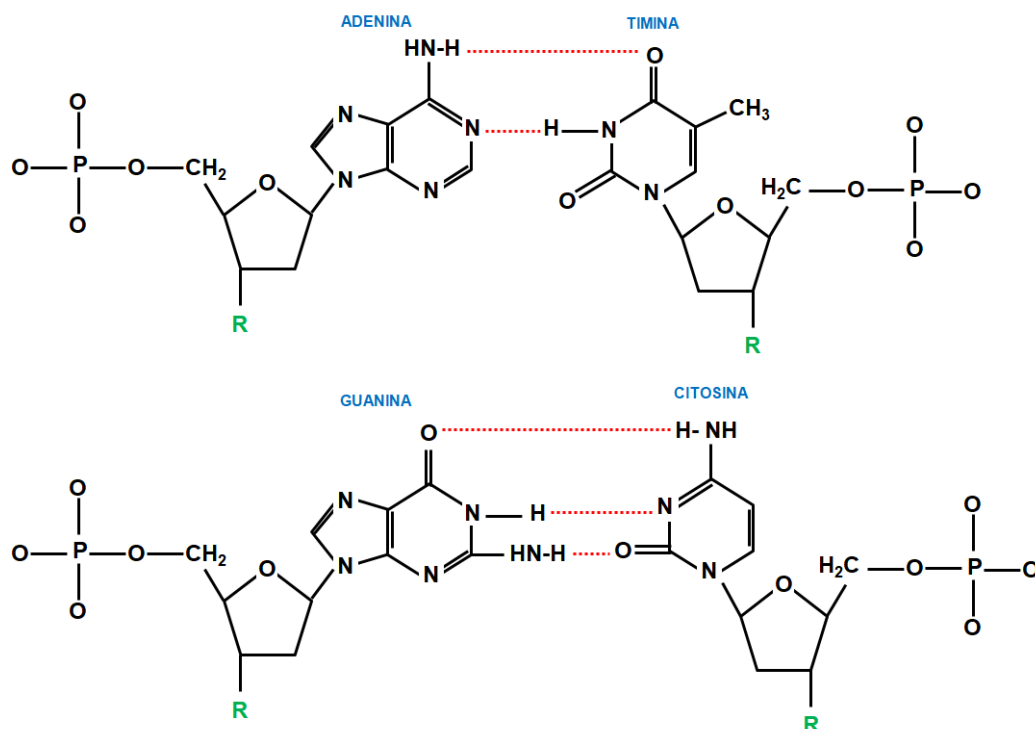


Figura 7 – Ligação de hidrogênio entre as bases nitrogenadas.

### 2.3.1 Estrutura Helicoidal do DNA

Uma observação importante que levou Watson e Crick à famosa descoberta da estrutura de dupla hélice do DNA é que os pares formados por uma purina e uma pirimidina têm quase o mesmo tamanho, de modo que esses pares dão uma estrutura muito regular às duas cadeias de nucleotídeos conectadas pelas ligações de hidrogênio.

Para entender porque essas duas cadeias nucleotídicas ligadas formam uma dupla hélice, é preciso considerar as interações entre os grupos que compõem os nucleotídeos. Os pares de bases são grandes grupos planos, com a forma de grandes platôs e unidos pelas fitas fosfato-pentose, que são bastante rígidas. Muitas rotações em torno das ligações são possíveis dentro de cada fita, mas a distância entre pontos de fixação consecutivos das bases é, no entanto, bem definida. A interação entre os platôs de base é tal que eles tendem a formar uma pilha compacta e isso se deve à sobreposição dos elétrons  $\pi$  dos ciclos das bases e às forças hidrofóbicas. O comprimento das fitas é, no entanto, longo demais para permitir que os platôs formem uma pilha compacta se forem empilhados paralelamente um ao outro, como mostra a Figura 8-a. Se os platôs forem empilhados um sobre o outro, mas com uma rotação de  $30^\circ$  entre eles, as fitas tornam-se oblíquas e pode-se manter os dois platôs em contato sem comprimir o comprimento das fitas, conforme mostrado na Figura 8-b. Outra possibilidade seria criar uma escada inclinada, mas um exame detalhado da estrutura das bases mostra que ela geraria contatos não permitidos energeticamente entre os átomos.

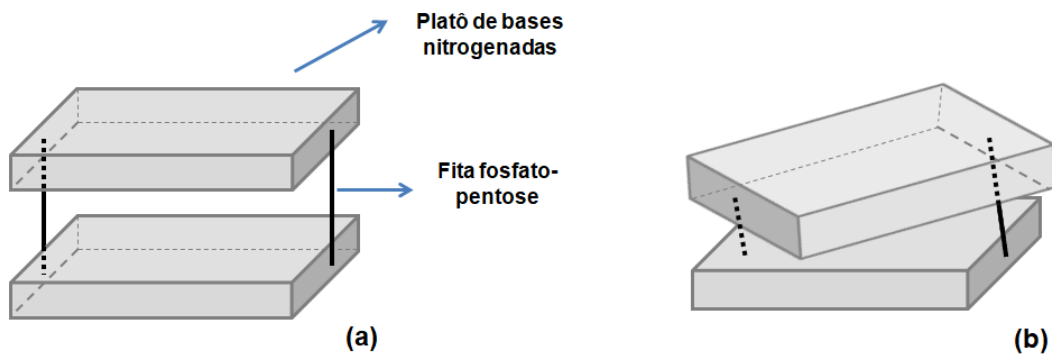


Figura 8 – Representação esquemática do empilhamento dos platôs de base do DNA, levando em consideração o comprimento das fitas fosfato-pentose: (a) se os platôs forem paralelos entre si, a fita é muito longo para permitir um empilhamento compacto. b) Se os platôs forem rodados um em relação ao outro, o mesmo comprimento de fita permite um empilhamento compacto.

Portanto, a topologia básica dos grupos e suas interações levam à conclusão de que a estrutura do DNA deve ser helicoidal. No entanto, essas simples considerações não são suficientes para determinar os detalhes da estrutura e, em particular, elas não determinam se a molécula deve ser levógira ou dextrógira. De fato, ambas as situações podem ser encontradas, mas a situação mais comum é uma hélice dextrógira, que existe em duas formas ligeiramente diferentes, conhecidas como formas de DNA A e B. Essas formas dependem do grau de hidratação da molécula ou da força iônica da solução. Nas células, a forma mais comum de DNA é a forma B, onde os platôs de base são aproximadamente perpendiculares ao eixo da hélice.

As dimensões básicas da molécula estão ilustradas na Figura 9, onde se pode notar que o comprimento da molécula é sempre muito maior que o seu diâmetro.

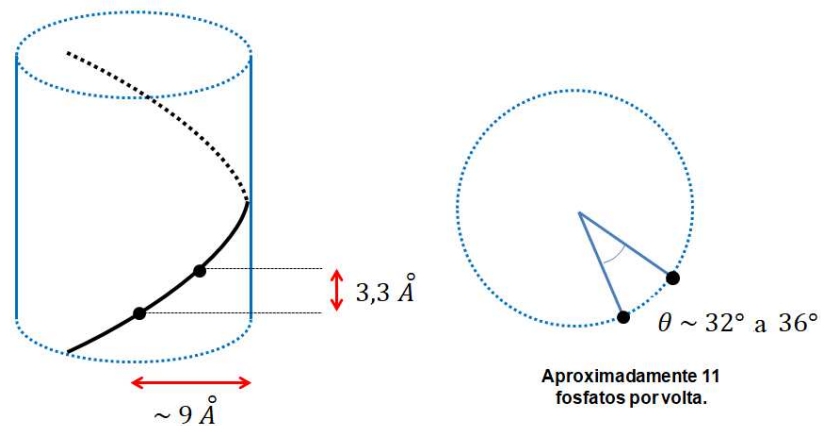


Figura 9 – Representação esquemática das dimensões básicas de uma molécula de DNA.

Existem essencialmente duas classes de forças que estabilizam a estrutura de dupla hélice. A saber:

- **Ligação de hidrogênio entre bases complementares:** somente dois tipos de pares de bases são permitidos pelo emparelhamento Watson-Crick: A-T, que é ligado por duas ligações de hidrogênio, e G-C, que é ligado por três ligações de hidrogênio e é mais robusta.
- **Interações de empilhamento dos platôs de pares de bases:** como mencionado anteriormente, essas interações têm uma origem complexa, advindo em parte da sobreposição dos elétrons  $\pi$  das bases e em parte de interações hidrofóbicas. Elas impõem uma distância bem definida entre as bases ao longo do eixo da hélice, dando origem a uma alta rigidez das moléculas ao longo do eixo. As bases podem, no entanto, ser puxadas para fora da pilha, deslizando uma sobre a outra de forma perpendicular ao eixo. As energias de empilhamento são altamente dependentes da sequência de bases. A Figura 10 apresenta algumas energias para diferentes pares de bases empilhadas.

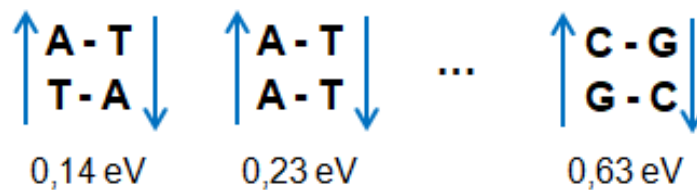


Figura 10 – Energias para diferentes pares de bases empilhadas.

## 2.4 Leitura do Código Genético

As proteínas são polímeros formados por aminoácidos que são ligados entre si por ligações peptídicas. As informações para a síntese proteica estão codificadas nos genes, que são segmentos da molécula de DNA. A síntese proteica envolve o DNA, o RNA, os ribossomos (organela celular), algumas enzimas específicas e aminoácidos. Esse processo ocorre em duas fases: a transcrição e a tradução.

A transcrição é o processo de leitura de um único gene do DNA. É realizada sob o controle de uma enzima, a RNA polimerase, que varre a longa molécula de DNA para encontrar o início do gene. Em seguida, desenrola a dupla hélice, conforme esquematizado na Figura 11. As bases expostas são copiadas e formam uma molécula de RNA, que será o molde para a síntese da proteína.

A tradução é o processo de leitura do RNA que foi produzido durante o processo de transcrição. Durante essa leitura, que ocorre no ribossomo, os aminoácidos são unidos de acordo com a sequência de bases nitrogenadas do RNA.

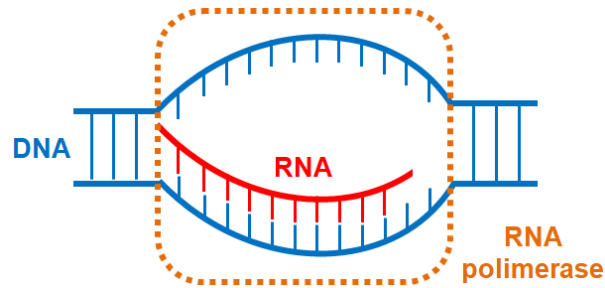


Figura 11 – Representação esquemática do processo de transcrição.

## 2.5 Desnaturação Térmica do DNA

Uma classe de experimentos que fornece dados úteis para modelar o DNA é a desnaturação térmica<sup>[7]</sup>, que consiste na separação das fitas do DNA por aquecimento. Essa separação ocorre quando a solução que contém o DNA é aquecida acima de temperaturas fisiológicas (próximo a  $100^{\circ}\text{C}$ ).

O processo de desnaturação é um processo reversível, pois ao resfriar lentamente as soluções aquecidas de DNA desnaturado, as duplas hélices são restauradas, isto é, as fitas simples encontram as suas fitas complementares.

Cada molécula de DNA possui uma temperatura de desnaturação característica  $T_m$ , que é determinada, em grande parte, pelo conteúdo de pares de bases nitrogenadas.

Experimentos realizados com moléculas de DNA artificiais com um único tipo de par de bases (homopolímeros) detectaram uma transição acentuada da absorção dos raios UV pela dupla hélice e pela molécula desnaturada, como apresentado na Figura 12. A desnaturação aparece como uma genuína transição de fase<sup>[21]</sup>.

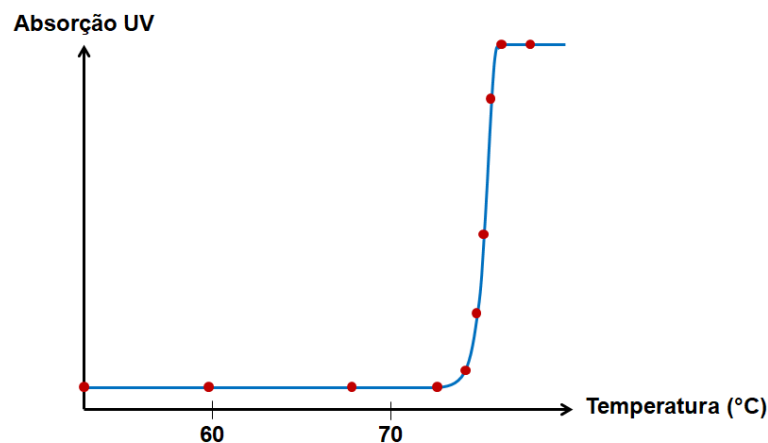


Figura 12 – Curva de desnaturação de um homopolímero de DNA contendo apenas pares de bases GC.

Utilizando a técnica de criomicroscopia, é possível observar que a desnaturação começa a partir de aberturas locais, chamadas "bolhas de desnaturação", que aumentam

com a temperatura e invadem toda a molécula ao atingir a temperatura de desnaturação, causando a separação das duas fitas, conforme é esquematicamente mostrado na Figura 13.

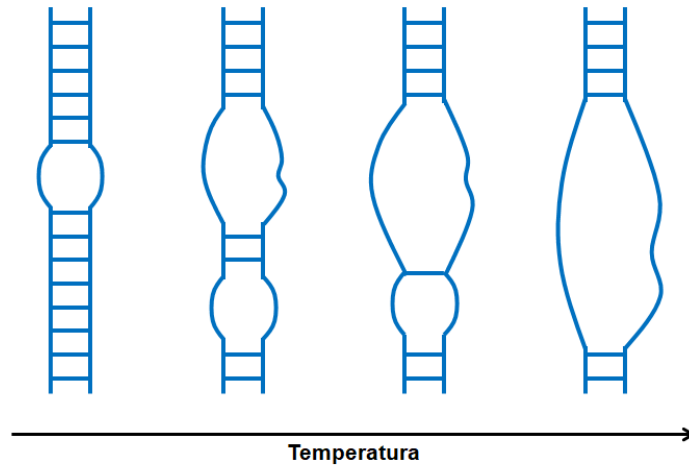


Figura 13 – Imagem esquemática do processo desnaturação térmica do DNA.

### 3 MODELO FÍSICO PARA O DNA

#### 3.1 Introdução

Conforme foi visto, a leitura do código genético requer mudanças conformacionais do DNA. Porém, tais movimentos são observados mesmo na ausência de enzimas. O DNA é uma entidade altamente dinâmica e sua estrutura apresenta diversos movimentos.

Neste capítulo, tem-se por objetivo estabelecer um modelo matemático da molécula de DNA que tenha soluções e propriedades que concordem com as observações experimentais.

Primeiramente, tem-se que estabelecer em que escala deseja-se trabalhar. Isso depende das propriedades em que se está interessado. Por exemplo, para analisar a intensidade das forças envolvidas na molécula de DNA, um modelo que ignore todos os detalhes internos da molécula e que simplesmente a descreva como uma mola flexível é suficiente.

Pode-se pensar também em descrever a dinâmica da molécula em escala atômica, entretanto, além da complexidade de tal modelo, essa não seria uma escolha que levaria ao estudo das propriedades desejadas, já que a atenção deste trabalho está voltada para a capacidade do DNA em armazenar informações genéticas e na grande amplitude de movimentos não-lineares envolvidos no processo de leitura. Assim, procura-se estabelecer um modelo que possa descrever essas propriedades. Desta forma, o modelo deve estar na escala da entidade básica que codifica as informações no DNA, ou seja, o par de bases nitrogenadas.

Para estudar a transcrição é necessário incluir pelo menos 100 pares de bases, pois esse processo se estende por mais de 20 pares de bases. Para estudar a desnaturação térmica do DNA, o modelo precisa se estender por centenas de pares de bases, porque a desnaturação é um efeito coletivo. Atualmente, a dinâmica molecular pode simular de 10 a 20 pares de bases, apenas para escalas de tempo de alguns nanossegundos. Essas simulações são cálculos enormes e aumentar o número de pares de bases em algumas ordens de magnitude está atualmente fora de alcance.

Por essa razão, os modelos em escalas intermediárias são úteis. O fato de esses modelos serem menos precisos não implica que seu desenvolvimento seja mais simples. É muito importante verificar a validade dos modelos e calibrar seus parâmetros por comparação com experimentos bem controlados.

### 3.2 O Modelo de Ising para o DNA

Considerando a escala de um par de bases nitrogenadas, o modelo mais simples para estudar é o modelo de Ising<sup>[7]</sup>. Nesse modelo, o estado de um par de bases é simplesmente descrito por uma variável de dois estados, tal que a variável é igual a 0 se a base estiver fechada e 1 se estiver aberta.

Modelos baseados no Modelo de Ising foram propostos e utilizados com sucesso para estudar a desnaturação térmica do DNA. No entanto, esse modelo apresenta alguns inconvenientes. São eles:

- Ele contém um grande número de parâmetros que não podem ser obtidos nem mesmo estimados a partir de leis da Física básica. Por exemplo, a energia para abrir um par de bases pode ser avaliada, mas, para descrever efeitos coletivos, também é necessário parâmetros como a probabilidade de um par de bases se abrir caso um par vizinho esteja aberto ou fechado.
- Como o modelo usa uma variável de dois estados para descrever o *status* de um par de bases, ele não pode representar a dinâmica não-linear de abertura ou fechamento, que requer a descrição de estados intermediários contínuos.

### 3.3 O Modelo de Peyrard-Bishop (PB)

Os modelos do tipo Peyrard-Bishop<sup>[8–10]</sup> assumem que as duas cadeias entrelaçadas do DNA podem ser descritas por uma única cadeia unidimensional. Mantém-se apenas um grau de liberdade por par de bases, mas utiliza-se uma variável real que descreve o alongamento da ligação que liga as bases, em vez da variável discreta 0/1 do modelo de Ising.

Esse modelo é apresentado esquematicamente na Figura 14, onde se denota por  $y_n$  o alongamento do  $n$ -ésimo par de bases. O valor  $y_n = 0$  corresponde a um par de bases fechado, como no modelo de Ising. No entanto,  $y_n$  pode assumir valores positivos continuamente até o infinito se as duas bases se separarem completamente, como na desnaturação do DNA. Por outro lado, a variável  $y_n$  pode assumir também valores negativos, correspondentes a uma compressão da ligação. Grandes valores negativos serão proibidos pelo impedimento estérico, que é introduzido no modelo pelo potencial de ligação das bases em um par.

A Hamiltoniana que descrever esse modelo é dada por:

$$H = \sum_n \left[ \frac{p_n^2}{2m} + W(y_n, y_{n-1}) + V(y_n) \right], \quad (3.1)$$

onde



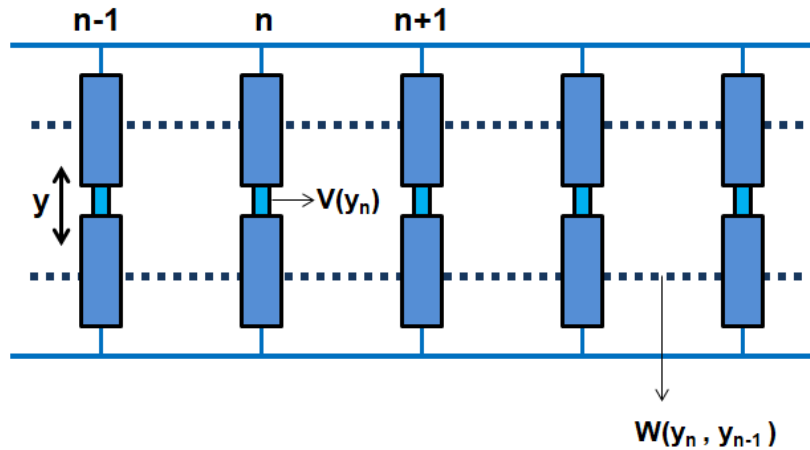


Figura 14 – Representação esquemática do Modelo PB para a dinâmica não-linear do DNA.

$$p_n = m \frac{dy_n}{dt}, \quad (3.2)$$

tal que  $m$  é a massa reduzida das bases (os pares de bases são considerados iguais),  $V(y)$  é o potencial que descreve a interação entre as duas bases em um par e  $W(y_n, y_{n-1})$  é o potencial que descreve a interação entre as bases adjacentes ao longo da molécula de DNA.

Tendo em vista que o potencial Morse é uma expressão padrão para ligações químicas e possui a forma qualitativa apropriada, ele pode ser utilizado para  $V(y)$ . Sua expressão matemática é dada por:

$$V(y) = D(e^{-ay} - 1)^2, \quad (3.3)$$

onde  $D$  é a energia de dissociação do par e  $a$  um parâmetro homogêneo com dimensão inversa a do comprimento que define a escala espacial do potencial. O potencial  $V(y)$  em função do alongamento  $y$  é representado graficamente na Figura 15.

O potencial de Morse é uma escolha adequada, pois:

- Inclui uma parte repulsiva forte para  $y < 0$ , correspondente ao obstáculo estérico mencionado anteriormente;
- Possui um mínimo na posição de equilíbrio  $y = 0$ ;
- Torna-se plano para  $y$  grande, com isso, a força entre as bases tende a zero, como esperado quando as bases estão muito distantes; isso caracteriza uma dissociação completa do par de bases, o que não ocorreria caso um potencial harmônico simples fosse escolhido.

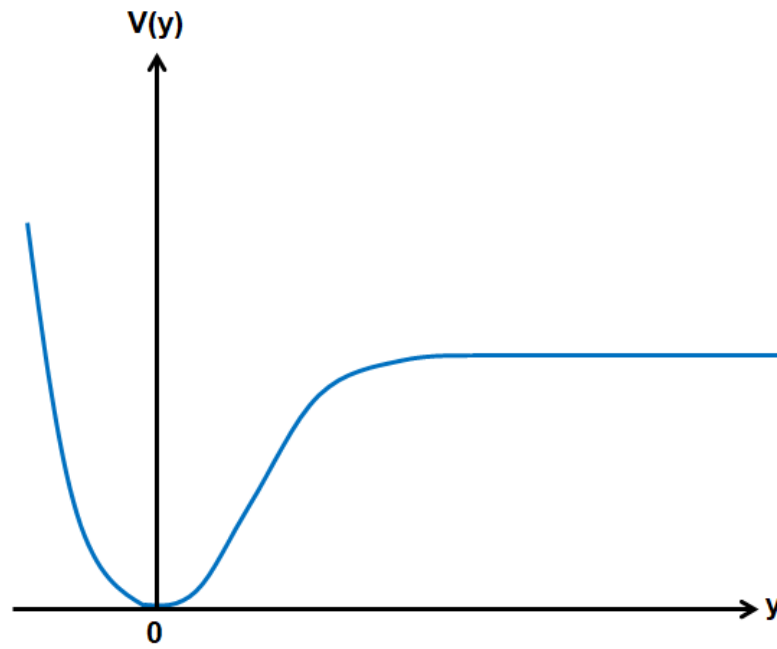


Figura 15 – Potencial de Morse.

A princípio, é possível utilizar uma expressão simples para  $W(y_n, y_{n-1})$ , dada por:

$$W(y_n, y_{n-1}) = \frac{1}{2R}(y_n - y_{n-1})^2, \quad (3.4)$$

onde  $R$  é uma constante positiva e adimensional, que se refere à intensidade do acoplamento das duas bases consecutivas. Essa constante faz o papel de uma discretização efetiva,  $a = \sqrt{R}$ , de modo que  $R \gg 1$  é o limite contínuo.

## 4 MÉTODO DAS COORDENADAS COLETIVAS APLICADO AO DNA

### 4.1 Introdução

A formação do estado aberto da molécula de DNA, que ocorre durante o processo de transcrição, por exemplo, sugere a existência de soluções solitônicas.

O primeiro exemplo relatado na literatura científica do que veio a ser chamado de sóliton foi descrito, em 1834, pelo engenheiro naval escocês John Scott Russel. Ele relatou que estava cavalgando ao longo de um canal e que ao observar um barco que estava sendo puxado por dois cavalos, reparou que a água que se acumulava em sua frente continuou adiante depois que o barco parou e manteve uma velocidade razoável e um formato arredondado sem sofrer deformação perceptível por um tempo considerável e por uma longa distância. Com o intuito de estudar o fenômeno observado, Russel tentou reproduzi-lo em menor escala utilizando um tanque profundo. A Figura 16 apresenta um de seus diagramas originais obtido durante seus estudos.

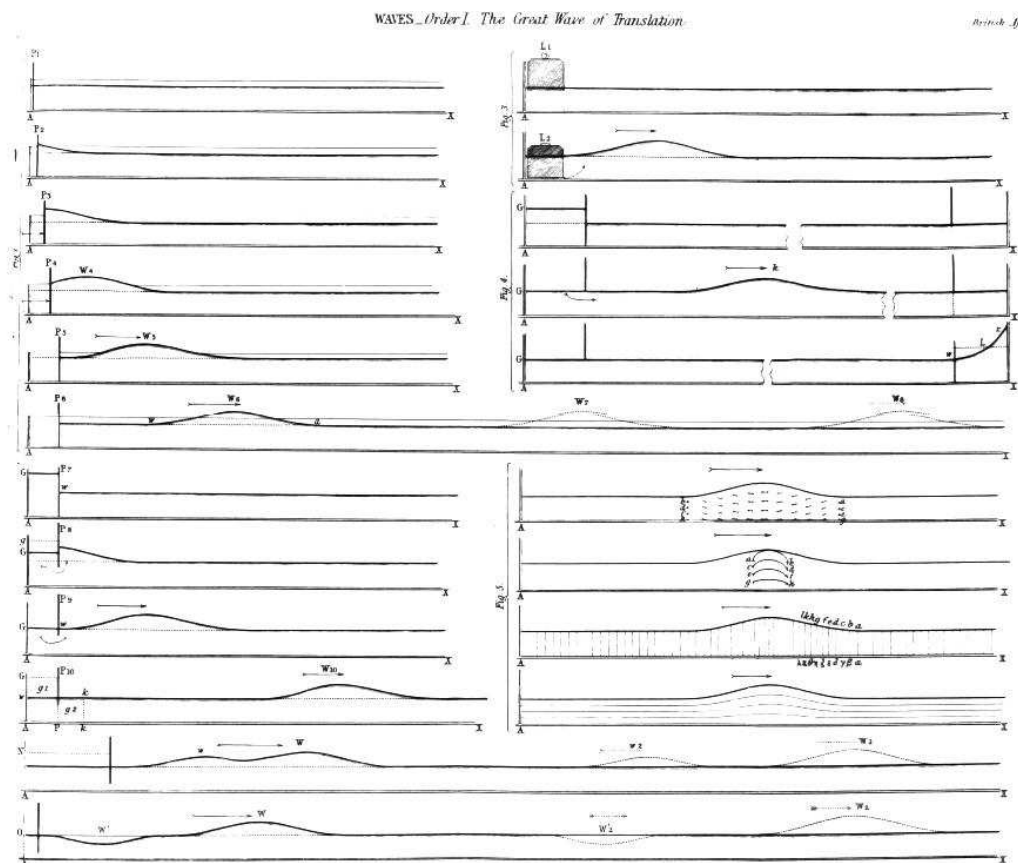


Figura 16 – Diagrama original de Russel ao estudar o fenômeno dos sólitons [22].

Embora não exista uma definição consensual, é possível definir um sóliton como uma onda solitária que se propaga sem deformação, com velocidade constante e sem dissipação de energia. As equações utilizadas para descrever os sólitons são soluções

localizadas que podem ser utilizadas como solução para uma grande classe de equações diferenciais não-lineares.

Sempre que se quantizam soluções estáticas de uma teoria invariante por translação, surgem modos de frequência zero<sup>[18,20]</sup>. Esses modos tornam-se um problema para a obtenção de uma Hamiltoniana quântica geral. O Método das Coordenadas Coletivas<sup>[11-16]</sup> permite tratar corretamente esses modos de frequência zero e deduzir uma Hamiltoniana quântica geral para o sistema.

Neste capítulo, parte-se do Modelo de Peyrard-Bishop (PB) para se encontrar uma nova Hamiltoniana Quântica Geral.

## 4.2 Método das Coordenadas Coletivas

Na quantização por coordenadas coletivas, expande-se  $y_n$  (alongamento do  $n$ -ésimo par de bases) como

$$y_n = y^0(n - \hat{x}_0) + \sum_{\alpha \neq 0} Q_\alpha \psi_\alpha(n - \hat{x}_0). \quad (4.1)$$

Essa expansão equivale a uma mudança de base no espaço funcional das coordenadas "cartesianas"  $\{y_n\}$  para as coordenadas "curvilíneas"  $\{\hat{x}_0, Q_{\alpha \neq 0}\}$ , onde a variável  $\hat{x}_0$  corresponde ao centro de massa do sóliton. Os autovetores são normalizados como

$$\sum_n \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) \psi_\beta(n - \hat{x}_0) = \delta_{\alpha\beta}. \quad (4.2)$$

Como consequência da invariância translacional, existe um modo com autovalor zero dado por<sup>[16]</sup>

$$\psi_0(n - \hat{x}_0) = \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial y_n^0}{\partial \hat{x}_0}, \quad (4.3)$$

onde  $M$  é a massa do sóliton, a qual é identificada como a energia de um sóliton estático.

A flutuação ao longo da direção funcional correspondente ao modo de frequência zero representa uma translação infinitesimal do sóliton que não requer energia. Como esse modo não possui força restauradora, é permitida energeticamente qualquer flutuação de amplitude arbitrariamente grande ao longo dessa direção e, portanto, as flutuações nessa direção devem ser tratadas sem perturbações. A variável  $\hat{x}_0$  é elevada ao status de variável da Mecânica Quântica e as flutuações são ortogonais ao modo zero. Esse tratamento é a base do Método das Coordenadas Coletivas<sup>[11-16]</sup>.

O próximo passo é expressar a Hamiltoniana em termos das novas variáveis  $\hat{x}_0$  e  $Q_\alpha$ . Para isso, escrevem-se, primeiramente, as energias cinética e potencial do sistema em termos dessas novas variáveis.

#### 4.2.1 Energia Cinética

A energia cinética  $T$  na representação de Schrödinger pode ser expressa por meio de uma derivada funcional, dada pela expressão

$$T = -\frac{1}{2} \sum_n \frac{\delta}{\delta y_n} \frac{\delta}{\delta y_n}, \quad (4.4)$$

onde a derivada funcional pode ser escrita em termos das novas coordenadas, usando a regra da cadeia

$$\frac{\delta}{\delta y_n} = \frac{\delta \hat{x}_0}{\delta y_n} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} + \sum_{\beta \neq 0} \frac{\delta Q_\beta}{\delta y_n} \frac{\delta}{\delta Q_\beta}. \quad (4.5)$$

Tomando a variação funcional do campo  $y_n$ , dado pela equação (4.1), tem-se que

$$\begin{aligned} \delta y_n &= \frac{\delta y_n}{\delta \hat{x}_0} \delta \hat{x}_0 + \sum_{\beta \neq 0} \frac{\delta y_n}{\delta Q_\beta} \delta Q_\beta \\ &= \left[ \frac{\partial y^0(n - \hat{x}_0)}{\partial \hat{x}_0} + \sum_{\beta \neq 0} Q_\beta \frac{\partial \psi_\beta(n - \hat{x}_0)}{\partial \hat{x}_0} \right] \delta \hat{x}_0 + \sum_{\beta \neq 0} \psi_\beta(n - \hat{x}_0) \delta Q_\beta. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Projetando os dois lados da equação (4.6) em  $\psi_0^*(n - \hat{x}_0)$  e  $\psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0)$  com  $\alpha \neq 0$ , usando a equação (4.3) e a condição de ortonormalização (4.2), obtém-se (*vide* Apêndice B para detalhes do desenvolvimento)

$$\frac{\delta \hat{x}_0}{\delta y_n} = \frac{1}{\sqrt{M} \left[ 1 + \sqrt{M} \sum_{\beta \neq 0} S_\beta Q_\beta \right]} \psi_0^*(n - \hat{x}_0), \quad (4.7)$$

$$\frac{\delta Q_\alpha}{\delta y_n} = \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) - \frac{1}{\sqrt{M} \left[ 1 + \sqrt{M} \sum_{\mu \neq 0} S_\mu Q_\mu \right]} \psi_0^*(n - \hat{x}_0), \quad (4.8)$$

onde os elementos de matriz  $G_{\alpha\beta}$  são definidos como

$$G_{\alpha\beta} = \sum_n \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) \frac{\partial \psi_\beta(n - \hat{x}_0)}{\partial \hat{x}_0}, \quad (4.9)$$

$$S_\beta = \sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \frac{\partial \psi_\beta(n - \hat{x}_0)}{\partial \hat{x}_0} \equiv G_{0\beta}, \quad (4.10)$$

tal que  $S_\beta$  é uma classe especial de elementos matriciais de  $G_{\alpha\beta}$ .

Substituindo as equações (4.7) e (4.8) em (4.5) e, posteriormente, em (4.4), a energia cinética  $T$  fica expressa em termos de  $\hat{x}_0$  e  $Q_\beta$  como

$$T = \frac{1}{2} \sum_n \left\{ \frac{\psi_0^*(n - \hat{x}_0)}{\sqrt{D}} \left[ \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \right] + \sum_{\beta \neq 0} \psi_\beta^*(n - \hat{x}_0) \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \right\} \times \\ \times \left\{ \frac{\psi_0^*(n - \hat{x}_0)}{\sqrt{D}} \left[ \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \sum_{\gamma \neq 0} \left( \sum_{\mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \right) \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \right] + \sum_{\gamma \neq 0} \psi_\gamma^*(n - \hat{x}_0) \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \right\}, \quad (4.11)$$

onde  $\sqrt{D}$  é o Jacobiano associado à mudança de coordenadas. Ele é dado por

$$\sqrt{D} \equiv \left[ \sqrt{M} + \sum_{\mu \neq 0} Q_\mu S_\mu \right]. \quad (4.12)$$

Utilizando a equação (4.12), a equação (4.11) pode ser expressa da seguinte maneira (*vide* Apêndice C para detalhes do desenvolvimento)

$$T = -\frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{D} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \frac{1}{\sqrt{D}} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} \sum_{\beta, \nu \neq 0} \left[ \frac{G_{\beta\nu} Q_\nu}{\sqrt{D}} \frac{\delta}{\delta Q_\beta} + \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{G_{\beta\nu} Q_\nu}{\sqrt{D}} \right] + \right. \\ \left. + \frac{1}{\sqrt{D}} \sum_{\gamma, \beta, \mu, \nu \neq 0} \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \left[ \delta_{-\gamma, \beta} \sqrt{D} + \frac{G_{\beta\nu} Q_\nu}{\sqrt{D}} G_{\gamma\nu} Q_\nu \right] \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \right\}. \quad (4.13)$$

Obtém-se, assim, uma expressão para a energia cinética dada em termos das variáveis  $\hat{x}_0$  e  $Q_\alpha$ .

#### 4.2.2 Energia Potencial

A energia potencial  $U$  total é dada por:

$$U(y_n) = \sum_n \left[ \frac{1}{2R} (y_n - y_{n-1})^2 + V(y_n) \right]. \quad (4.14)$$

Utilizando a expressão dada por (4.1), verifica-se que a energia potencial total pode ser escrita em termos das novas coordenadas através da expansão de  $V(y_n)$  em torno  $y_n$  (*vide* Apêndice D para detalhes do desenvolvimento):

$$U(y_n) = \sum_n \left[ \frac{1}{2R} (\Delta_1 y^0)^2 + V(y^0) \right] + \\ + \sum_n \frac{1}{2R} \left( \Delta_1 \sum_{\alpha \neq 0}^\infty Q_\alpha \psi_\alpha(n - \hat{x}_0) \right) + \\ + \sum_n \frac{1}{2!R} \frac{d^2 V}{dy_n^2} \Big|_{y^0} \left( \sum_{\alpha \neq 0}^\infty Q_\alpha \psi_\alpha(n - \hat{x}_0) \right)^2 + \dots, \quad (4.15)$$

onde  $\Delta_1 y_n = y_n - y_{n-1}$  denota a derivada primeira.

Após cálculos diretos (*vide* Apêndice E), obtém-se

$$U = U[y^0] + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta \neq 0} Q_\alpha^* Q_\beta \left\{ \sum_n \psi_\alpha^* \left[ -\frac{1}{R} \Delta_2 + \frac{d^2 V}{dy_n^2} \Big|_{y^0} \right] \psi_\beta + \dots \right\}, \quad (4.16)$$

onde  $\Delta_2 y_n = y_{n+1} + y_{n-1} - 2y_n$  denota a derivada segunda.

O termo entre colchetes é um operador diferencial de segunda ordem que possui autovalores  $\omega_\beta$  e autovetores  $\psi_\beta(n - \hat{x}_0)$  dados por

$$\left[ -\frac{1}{R} \Delta_2 + \frac{d^2 V}{dy_n^2} \Big|_{y_n^0} \right] \psi_\beta(n - \hat{x}_0) = \omega_\beta^2 \psi_\beta(n - \hat{x}_0), \quad (4.17)$$

em que os autovetores  $\psi_\beta(n - \hat{x}_0)$  são normalizados da maneira apresentada na equação (4.2).

Assim, é possível escrever a energia potencial total  $U$  da seguinte forma (*vide* Apêndice F):

$$U[y] = M + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta \neq 0} Q_\alpha^* Q_\beta \omega_\beta^2 \delta_{\alpha\beta} + \mathcal{O}(Q^3). \quad (4.18)$$

Pode-se escrever a equação (4.18) da seguinte forma:

$$U[y] = M + \frac{1}{2} \sum_{\beta \neq 0} Q_{-\beta} Q_\beta \omega_\beta^2 + \mathcal{O}(Q^3), \quad (4.19)$$

sendo que  $Q_{-\beta} = Q_\beta^*$ .

### 4.2.3 Hamiltoniana Quântica Geral

O sistema pode ser quantizado promovendo à categoria de operadores as coordenadas e seus respectivos momentos conjugados, e impondo as relações de comutação canônica a seguir:

$$[\pi_k, Q'_k] = -i\delta_{k, -k'}, \quad (4.20)$$

$$[\pi_k, \pi'_k] = [Q_k, Q_{k'}] = 0. \quad (4.21)$$

Os momentos conjugados a  $\hat{x}_0$  e  $Q_n$  podem ser identificados, respectivamente, como

$$\pi_0 \equiv P = -i \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0}, \quad (4.22)$$

$$\pi_k = -\frac{\delta}{\delta Q_{-k}}, \quad k \neq 0. \quad (4.23)$$

A Hamiltoniana pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2m} \frac{P^2}{D} + \frac{P}{\sqrt{D}} \sum_{\beta, \nu \neq 0} \left( \frac{G_{\beta\nu} Q_\nu}{\sqrt{D}} \pi_{-\beta} + \pi_{-\beta} \frac{G_{\beta\nu} Q_\nu}{\sqrt{D}} \right) + \\
&+ \frac{1}{2m} \frac{1}{\sqrt{D}} \sum_{\gamma, \beta, \mu, \nu \neq 0} \pi_{-\beta} \left( \delta_{-\gamma, \beta} \sqrt{D} + \frac{G_{\beta\mu} Q_\mu}{\sqrt{D}} G_{\gamma\nu} Q_\nu \right) \pi_{-\gamma} + \\
&+ M + \sum_{\alpha \neq 0} \frac{\omega_\alpha^2}{2} Q_\alpha Q^{-\alpha} + \mathcal{O}(Q^3), \tag{4.24}
\end{aligned}$$

onde os  $Q_\alpha$  são, agora, operadores.

Reescrevendo a equação (4.24), tem-se que

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2m} \left( \frac{P^2}{D} + 2 \frac{P}{D} \sum_{\beta, \nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \pi_{-\beta} + \sum_{\beta \neq 0} \pi_{-\beta} \pi_\beta \right) + \\
&+ \frac{1}{2m} \frac{1}{D} \sum_{\gamma, \beta, \mu, \nu \neq 0} (\pi_{-\beta} G_{\beta\mu} Q_\mu) (\pi_{-\gamma} G_{\gamma\nu} Q_\nu) + M \\
&+ \sum_{\alpha \neq 0} \frac{\omega_\alpha^2}{2} Q_\alpha Q_{-\alpha} + \mathcal{O}(Q^3). \tag{4.25}
\end{aligned}$$

Fazendo a troca de índices:  $(-\beta, -\gamma) \rightarrow m$  e  $(\mu, \nu \rightarrow n)$ , chega-se

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2m} \frac{1}{D} \left[ P^2 + 2P \sum_{m, n \neq 0} G_{-mn} Q_n \pi_m + \left( \sum_{m, n \neq 0} G_{-mn} Q_n \pi_m \right)^2 \right] + \\
&+ \frac{1}{2m} \sum_{m \neq 0} \pi_m \pi_{-m} + M + \sum_{\alpha \neq 0} \frac{\omega_\alpha^2}{2} Q_\alpha Q_{-\alpha} + \mathcal{O}(Q^3) \tag{4.26}
\end{aligned}$$

que pode ser reescrita como:

$$H = M + \frac{1}{2D} \left( P + \sum_{m, n \neq 0} B_{mn} Q_n \pi_m \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{m \neq 0} (\pi_m \pi_{-m} + \omega_m^2 Q_m Q_{-m}) + \mathcal{O}(Q^3), \tag{4.27}$$

onde  $B_{mn} = -G_{mn}$  e  $\frac{1}{2m} \equiv \frac{1}{2}$ .

Tomando o limite em que  $\frac{1}{D} \approx \frac{1}{M}$ , tem-se que:

$$H = M + \frac{1}{2M} \left( P + \sum_{m, n \neq 0} B_{mn} Q_n \pi_m \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{m \neq 0} (\pi_m \pi_{-m} + \omega_m^2 Q_m Q_{-m}) + \mathcal{O}(Q^3). \tag{4.28}$$



Além disso, no limite de acoplamento fraco, os termos de ordem superior do potencial  $\mathcal{O}(Q^3)$  podem ser negligenciados.

Toda vez que um sistema possuir invariância translacional e admitir soluções localizadas, sua dinâmica será descrita por uma Hamiltoniana do formato de (4.28).

Pode-se notar que a expressão para a Hamiltoniana do sistema contém agora um termo do tipo partícula livre associado ao movimento do centro do sóliton, acoplado com as flutuações em torno da solução solitônica o que leva a um movimento dissipativo. O segundo termo corresponde a um conjunto de osciladores desacoplados.

O termo ao quadrado na equação (4.28) assemelha-se a expressão para uma partícula livre carregada em um campo eletromagnético, onde esse campo desempenha papel análogo ao do banho onde o DNA encontra-se inserido.

## 5 CONCLUSÃO

Esta dissertação foi dividida da seguinte forma: primeiramente, apresentou-se a estrutura da molécula de DNA e suas características; depois, apresentaram-se modelos matemáticos já existentes que descrevem a dinâmica dessa molécula; e, por fim, chegou-se ao objetivo principal deste trabalho, que é obter uma Hamiltoniana quântica geral através do método das coordenadas coletivas.

O capítulo inicial partiu de uma breve retrospectiva histórica sobre o DNA. Ainda no capítulo inicial, apresentou-se a estrutura da molécula de DNA, suas principais características e dois processos nos quais a molécula de DNA sofre grandes alterações conformacionais: a transcrição e a desnaturação.

No capítulo seguinte, apresentaram-se os modelos matemáticos de Ising e de Peyrard-Bishop para o DNA.

No último capítulo, chegou-se ao objetivo principal deste trabalho: com base no modelo de Peyrard-Bishop para a molécula de DNA, aplicou-se o método de coordenadas coletivas para reescrever a Hamiltoniana do sistema como uma Hamiltoniana conhecida, que é a Hamiltoniana de uma partícula livre, associada ao movimento do centro do sóliton, imersa em um banho térmico.

Viu-se que a complexidade da estrutura e organização da molécula de DNA leva a efeitos não-lineares que podem conduzir à presença de excitações do tipo sóliton. Por consequência da invariância translacional, surgem os modos de frequência zero.

Utilizou-se o Método das Coordenadas Coletivas para tratar corretamente esses modos zero e obter a Hamiltoniana quântica geral.

A nova Hamiltoniana foi obtida partindo-se do Modelo de Peyrard-Bishop, cuja Hamiltoniana é dada pela equação (3.1).

Primeiramente, expandiu-se a coordenada  $y_n$  de acordo com equação (4.1), equivalendo a uma mudança de base no espaço funcional das "coordenadas cartesianas" para as "coordenadas curvilíneas"  $\{\hat{x}_0, Q_{\alpha \neq 0}\}$ . Obteve-se, então, as energias cinética e potencial do sistema em função dessas novas coordenadas, dadas, respectivamente, pelas equações (4.13) e (4.19). Com essas informações foi possível escrever a Hamiltoniana dada por (4.28) em função dos momentos conjugados a  $\hat{x}_0$  e  $Q_\alpha$ , dados, respectivamente, por (4.22) e (4.23).

A expressão (4.28) continha um termo do tipo partícula livre associado ao movimento do centro do sóliton e um termo correspondente a um conjunto de osciladores desacoplados.

Toda vez que um sistema possuir invariância translacional e admitir soluções localizadas, sua dinâmica será descrita por uma Hamiltoniana do formato de (4.28).

## 5.1 Perspectivas Futuras

É possível aplicar o método de integrais de trajetória para o sistema fora do equilíbrio termodinâmico, o que permite discutir quais os efeitos da interação do DNA com um banho térmico, o que descreve a ação do solvente sobre o DNA.

Pode-se estudar também as propriedades termodinâmicas da molécula, como calor específico e entropia, durante o processo de desnaturação.

## APÊNDICE A – Estrutura do RNA

Assim como o DNA, o RNA (ácido ribonucleico) é constituído de unidades monoméricas chamadas nucleotídeos. Porém, é formado por um único polímero (uma única fita), conforme esquematizado na Figura 17.

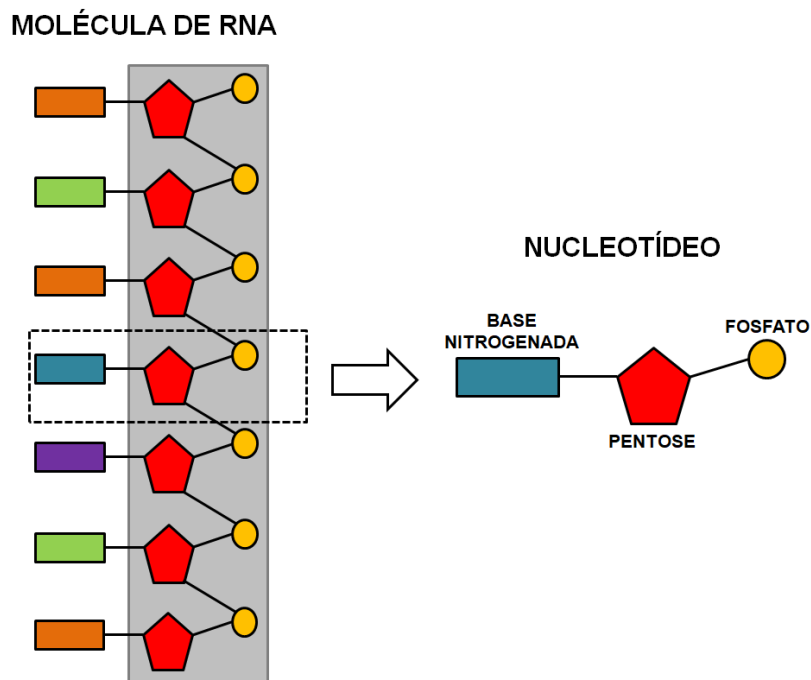


Figura 17 – Representação esquemática da estrutura planificada do RNA e de um nucleotídeo.

Outra diferença existente entre a estrutura do RNA e do DNA é que a pentose que constitui cada nucleotídeo do RNA é a ribose e não a desoxirribose. Além disso, as bases nitrogenadas do RNA são a adenina, guanina, citosina e uracila. A uracila substitui a timina e sua fórmula estrutural está representada na Figura 18.

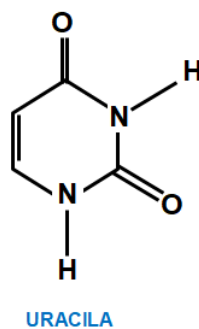


Figura 18 – Representação química da estrutura da base nitrogenada uracila.

O RNA desempenha um papel crucial na expressão genética por atuar como o intermediário entre a informação genética codificada no DNA e as proteínas. Há três tipos de RNA: o RNA mensageiro (mRNA), o RNA ribossômico (rRNA) e o RNA transportador (tRNA).

O RNA mensageiro representa apenas 5% do RNA total da célula. É o mais heterogêneo dos três tipos de RNA em termos de tamanho e sequência de base. Ele carrega o código genético complementar copiado do DNA durante a transcrição.

O RNA ribossômico é encontrado nos ribossomos e responde por 80% do RNA total presente na célula. Os rRNAs combinam-se com proteínas e enzimas no citoplasma para formar os ribossomos, que atuam como o local da síntese proteica. Essas estruturas complexas viajam ao longo da molécula de mRNA durante a tradução e facilitam a montagem de aminoácidos para formar uma cadeia polipeptídica. Eles interagem com tRNAs e outras moléculas.

O RNA transportador é o menor dos três tipos de RNA, possuindo por volta de 75 a 95 nucleotídeos. Sua principal função é o transporte dos aminoácidos durante a síntese proteica. Cada aminoácido tem um tRNA específico que se liga a ele e o transporta para a cadeia polipeptídica em crescimento. Os tRNAs também atuam como adaptadores na tradução da sequência genética do mRNA em proteínas.

## APÊNDICE B – Obtenção das Equações (4.6) e (4.7)

Multiplicando ambos os lados da equação (4.6) por  $\psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0)$ , obtém-se:

$$\begin{aligned} \delta y_n \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) &= \left[ \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) \frac{\partial y^{(0)}(n - \hat{x}_0)}{\partial \hat{x}_0} + \sum_{\beta \neq 0}^{\infty} \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) \frac{\partial \psi_\beta(n - \hat{x}_0)}{\partial \hat{x}_0} Q_\beta \right] \delta \hat{x}_0 + \\ &+ \sum_{\beta \neq 0}^{\infty} \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) \psi_\beta(n - \hat{x}_0) \delta Q_\beta, \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

sendo

$$\frac{\partial y^{(0)}(n - \hat{x}_0)}{\partial \hat{x}_0} = \psi_0(n - \hat{x}_0) \sqrt{M}. \quad (\text{B.2})$$

Somando em  $n$ , tem-se que:

$$\begin{aligned} \sum_n \delta y_n \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) &= \left[ \sum_n \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) \psi_0(n - \hat{x}_0) \sqrt{M} + \sum_n \sum_{\beta \neq 0}^{\infty} \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) \frac{\partial \psi_\beta(n - \hat{x}_0)}{\partial \hat{x}_0} Q_\beta \right] \delta \hat{x}_0 \\ &+ \sum_{\beta \neq 0}^{\infty} \delta_{\alpha\beta} \delta Q_\beta \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

A equação (B.3) pode ser escrita como:

$$\sum_n \delta y_n \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) = \sum_{\beta \neq 0}^{\infty} Q_\beta G_{\alpha\beta} \delta \hat{x}_0 + \delta Q_\alpha, \quad (\text{B.4})$$

onde

$$G_{\alpha\beta} = \sum_n \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) \frac{\partial \psi_\beta(n - \hat{x}_0)}{\partial \hat{x}_0}. \quad (\text{B.5})$$

Agora, multiplicando a equação (4.6) por  $\psi_0^*(n - \hat{x}_0)$ , obtém-se

$$\begin{aligned} \delta y_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) &= \left[ \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \frac{\partial y^{(0)}(n - \hat{x}_0)}{\partial \hat{x}_0} + \sum_n \sum_{\beta \neq 0}^{\infty} \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \frac{\partial \psi_\beta(n - \hat{x}_0)}{\partial \hat{x}_0} Q_\beta \right] \delta \hat{x}_0 \\ &+ \sum_{\beta \neq 0}^{\infty} \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \psi_\beta(n - \hat{x}_0) \delta Q_\beta. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Usando a equação (B.2), tem-se que:

$$\begin{aligned} \sum_n \delta y_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) &= \left[ \sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \psi_0(n - \hat{x}_0) \sqrt{M} + \sum_n \sum_{\beta \neq 0}^{\infty} \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \frac{\partial \psi_\beta(n - \hat{x}_0)}{\partial \hat{x}_0} Q_\beta \right] \delta \hat{x}_0 \\ &+ \sum_{\beta \neq 0}^{\infty} \delta_{0\beta} \delta Q_\beta, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

sendo

$$\sum_n \delta y_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) = \left[ \sqrt{M} + \sum_{\beta \neq 0}^{\infty} S_\beta Q_\beta \right] \delta \hat{x}_0 \quad (\text{B.8})$$

onde a equação (B.8) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\sum_n \delta y_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) = \sqrt{M} \left[ 1 + M^{-1/2} \sum_{\beta \neq 0}^{\infty} S_\beta Q_\beta \right] \delta \hat{x}_0. \quad (\text{B.9})$$

Da equação (B.9), tem-se que:

$$\delta \hat{x}_0 = \sum_n \frac{1}{\sqrt{M} [1 + M^{-1/2} \sum_{\beta \neq 0} S_\beta Q_\beta]} \delta y_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0), \quad (\text{B.10})$$

onde

$$S_\beta = \sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \frac{\partial \psi_\beta(n - \hat{x}_0)}{\partial \hat{x}_0} \equiv G_{0\beta}. \quad (\text{B.11})$$

Substituindo a equação (B.10) em (B.4), obtém-se:

$$\delta Q_\alpha = \sum_n \delta y_n \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) - \sum_{\beta \neq 0} G_{\alpha\beta} Q_\beta \frac{\sqrt{M}}{[1 + M^{-1/2} \sum_{\mu \neq 0} S_\mu Q_\mu]} \sum_n \delta y_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \quad (\text{B.12})$$

ou ainda, pode-se escrever a equação (B.12) da seguinte forma:

$$\delta Q_\alpha = \sum_n \left\{ \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) - \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \sqrt{M} \left[ 1 + M^{-1/2} \sum_{\mu \neq 0} S_\mu Q_\mu \right] \right\} \delta y_n. \quad (\text{B.13})$$

Assim, obtém-se as equações (4.7) e (4.8).

## APÊNDICE C – Obtenção da equação (4.13)

Para simplificar a expressão (4.11), necessita-se das seguintes relações:

$$\sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \frac{\delta \psi_0^*(n - \hat{x}_0)}{\delta \hat{x}_0} = 0, \quad (\text{C.1})$$

$$\sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \frac{\delta \psi_\gamma^*(n - \hat{x}_0)}{\delta \hat{x}_0} = S_{-\gamma}, \quad (\text{C.2})$$

$$\sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \psi_\gamma^*(n - \hat{x}_0) = \delta_{0,-\gamma}, \quad (\text{C.3})$$

$$\frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} G_{\gamma\mu} = \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} S_\mu = 0, \quad (\text{C.4})$$

$$\frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{1}{\sqrt{D}} = -\frac{S_\beta}{D}, \quad (\text{C.5})$$

$$G_{\beta\nu} Q_\nu \frac{\delta}{\delta Q_\beta} = G_{\beta\nu} \frac{\delta}{\delta Q_\beta} Q_\nu, \quad (\text{C.6})$$

tal que  $\sum_\beta G_{\beta\beta} = 0$  e  $\psi_k^* = \psi_k^*$ .

A equação (4.11) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} T = & -\frac{1}{2m} \sum_n \left[ \frac{\psi_0^*(n - \hat{x}_0)}{\sqrt{D}} [\beta, \nu] \frac{\psi_0^*(n - \hat{x}_0)}{\sqrt{D}} [\gamma, \mu] + \sum_{\gamma \neq 0} \frac{\psi_0^*(n - \hat{x}_0)}{\sqrt{D}} [\beta, \nu] \psi_\gamma^*(n - \hat{x}_0) \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} + \right. \\ & \left. + \sum_{\beta \neq 0} \psi_\beta^*(n - \hat{x}_0) \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{\psi_0^*(n - \hat{x}_0)}{\sqrt{D}} [\gamma, \mu] + \sum_{\beta \neq 0} \sum_{\gamma \neq 0} \psi_\beta^*(n - \hat{x}_0) \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \psi_\gamma^*(n - \hat{x}_0) \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \right], \quad (\text{C.7}) \end{aligned}$$

onde cada um dos quatro termos da expressão anterior serão trabalhados a seguir. Eles serão denotados, respectivamente, por (I), (II), (III) e (IV). Trabalhando com (I):

$$\begin{aligned} (I) = & \sum_n \frac{\psi_0^*}{\sqrt{D}} \left[ \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \right] \times \frac{\psi_0^*}{\sqrt{D}} \left[ \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \sum_{\gamma \neq 0} \left( \sum_{\mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \right) \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \right] \\ = & \sum_n \left\{ \frac{\psi_0^*}{\sqrt{D}} \left[ \frac{1}{\sqrt{D}} \frac{\delta \psi_0^*}{\delta \hat{x}_0} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} + \psi_0^* \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} \frac{1}{\sqrt{D}} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} + \frac{\psi_0^*}{\sqrt{D}} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} + \right. \right. \\ & - \frac{1}{\sqrt{D}} \frac{\psi_0^*}{\delta \hat{x}_0} \sum_{\gamma \neq 0} \left( \sum_{\mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \right) \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} - \psi_0^* \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} \frac{1}{\sqrt{D}} \sum_{\gamma \neq 0} \left( \sum_{\mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \right) \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} + \\ & - \frac{\psi_0^*}{\sqrt{D}} \sum_{\gamma \neq 0} \left( \sum_{\mu \neq 0} \frac{\delta}{\hat{x}_0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \right) \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} - \frac{\psi_0^*}{\sqrt{D}} \sum_{\gamma \neq 0} \left( \sum_{\mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \right) \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} + \\ & \left. - \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) \psi_0^* \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{1}{\sqrt{D}} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) \frac{\psi_0^*}{\sqrt{D}} \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{\delta}{\hat{x}_0} + \right\} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& + \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) \psi_0^* \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{1}{\sqrt{D}} \sum_{\gamma \neq 0} \left( \sum_{\mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \right) \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} + \\
& + \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) \frac{\psi_0^*}{\sqrt{D}} \sum_{\gamma \neq 0} \left( \sum_{\mu \neq 0} G_{\gamma\mu} \delta_{\beta\mu} \right) + \\
& + \left. \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) \frac{\psi_0^*}{\sqrt{D}} \sum_{\gamma \neq 0} \left( \sum_{\mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \right) \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \right\}. \tag{C.8}
\end{aligned}$$

A equação (C.8) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
(I) & = \frac{1}{D} \sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} \\
& - \frac{1}{D} \sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \sum_{\gamma \neq 0} \left( \sum_{\mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \right) \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} + \\
& + \frac{1}{D^{\frac{3}{2}}} \sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) S_\beta \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} \\
& - \frac{1}{D} \sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} + \\
& - \frac{1}{D^{\frac{3}{2}}} \sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) \sum_{\gamma \neq 0} \left( \sum_{\mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \right) S_\beta \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \\
& + \frac{1}{D} \sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) \sum_{\gamma \neq 0} (G_{\gamma\beta}) \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} + \\
& + \frac{1}{D} \sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) \sum_{\gamma \neq 0} \left( \sum_{\mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \right) \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma}. \tag{C.9}
\end{aligned}$$

Como

$$\sum_n \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) \psi_\gamma^*(n - \hat{x}_0) = \delta_{\alpha\gamma}, \tag{C.10}$$

tem-se que

$$\begin{aligned}
(I) & = \frac{1}{D} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \frac{1}{D} \sum_{\gamma \neq 0} \left( \sum_{\mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \right) \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} + \\
& + \frac{1}{D^{\frac{3}{2}}} \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) S_\beta \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \frac{1}{D} \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} + \\
& - \frac{1}{D^{\frac{3}{2}}} \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) \sum_{\gamma \neq 0} \left( \sum_{\mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \right) S_\beta \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} + \frac{1}{D} \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) \sum_{\gamma \neq 0} (G_{\gamma\beta}) \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} + \\
& + \frac{1}{D} \sum_{\beta \neq 0} \left( \sum_{\nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \right) \sum_{\gamma \neq 0} \left( \sum_{\mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \right) \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma}
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{D}} \left[ \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \sum_{\gamma, \mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \right] \times \left[ \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \sum_{\beta, \nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \right]. \quad (\text{C.11})$$

Trabalhando com (II) agora:

$$\begin{aligned} (II) &= \sum_n \sum_{\gamma \neq 0} \frac{\psi_0^*}{\sqrt{D}} \left[ \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \sum_{\beta, \nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \right] \psi_\gamma^* \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \\ &= \sum_n \left[ \sum_{\gamma \neq 0} \frac{\psi_0^*}{\sqrt{D}} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} \psi_\gamma^* \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} - \sum_{\gamma, \beta, \nu \neq 0} \frac{\psi_0^*}{\sqrt{D}} \psi_\gamma^* G_{\beta\nu} Q_\nu \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \right] \\ &= \sum_{\gamma \neq 0} \frac{1}{\sqrt{D}} \left[ \sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \frac{\delta \psi_\gamma^*(n - \hat{x}_0)}{\delta \hat{x}_0} \right] \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} + \\ &\quad - \sum_{\gamma, \beta, \nu \neq 0} \frac{1}{\sqrt{D}} \left[ \sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \psi_\gamma^*(n - \hat{x}_0) \right] G_{\beta\nu} Q_\nu \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma}. \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

No entanto, tem-se que

$$\sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \frac{\delta \psi_\gamma^*(n - \hat{x}_0)}{\delta \hat{x}_0} = S_{-\gamma}, \quad (\text{C.13})$$

$$\sum_n \psi_0^*(n - \hat{x}_0) \psi_\gamma^*(n - \hat{x}_0) = \delta_{0, -\gamma}. \quad (\text{C.14})$$

Lembrando que  $\psi_k^* = \psi_{-k}$ . Chega-se a:

$$(II) = \frac{1}{\sqrt{D}} \sum_{\gamma \neq 0} S_{-\gamma} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma}, \quad (\text{C.15})$$

já que  $\gamma \neq 0$ .

Trabalhando com (III) agora:

$$\begin{aligned} (III) &= \sum_n \sum_{\beta \neq 0} \psi_\beta^* \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \left[ \frac{\psi_0^*}{\sqrt{D}} \left( \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \sum_{\gamma, \mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \right) \right] \\ &= \sum_n \sum_{\beta \neq 0} \psi_\beta^* \psi_0^* \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \left[ \frac{1}{\sqrt{D}} \left( \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \sum_{\gamma, \mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \right) \right] \\ &= 0. \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

Trabalhando com (IV) agora:

$$(IV) = \sum_n \sum_{\beta, \gamma \neq 0} \psi_\beta^*(n - \hat{x}_0) \psi_\gamma^*(n - \hat{x}_0) \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\beta, \gamma \neq 0} \left[ \sum_n \psi_\beta^*(n - \hat{x}_0) \psi_{-\gamma}(n - \hat{x}_0) \right] \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \\
&= \sum_{\beta, \gamma \neq 0} \delta_{\beta, -\gamma} \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \\
&= \sum_{\gamma \neq 0} \frac{\delta}{\delta Q_{-\gamma}} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma}.
\end{aligned} \tag{C.17}$$

Finalmente, a partir das equações (C.10), (C.14) e (C.16), pode-se escrever (4.4) como

$$\begin{aligned}
T &= \frac{-1}{2m} \left[ \frac{1}{\sqrt{D}} \left( \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \sum_{\gamma \mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \right) \times \frac{1}{\sqrt{D}} \left( \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \sum_{\beta \nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \right) \right] \\
&+ \sum_{\gamma \neq 0} \left( \frac{S_{-\gamma}}{\sqrt{D}} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} + \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \frac{\delta}{\delta Q_{-\gamma}} \right).
\end{aligned} \tag{C.18}$$

A equação (C.18) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
T &= \frac{-1}{2m} \left[ \frac{1}{D} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} - \frac{1}{\sqrt{D}} \frac{\delta}{\delta \hat{x}_0} \sum_{\beta, \nu \neq 0} \frac{G_{\beta\nu} Q_\nu}{\sqrt{D}} \frac{\delta}{\delta Q_\beta} - \sum_{\gamma, \mu \neq 0} \frac{1}{\sqrt{D}} G_{\gamma\mu} Q_\mu \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \left( \frac{1}{\sqrt{D}} \frac{\delta}{\delta x_0} \right) \right. \\
&+ \left. \frac{1}{\sqrt{D}} \sum_{\gamma, \mu \neq 0} G_{\gamma\mu} Q_\mu \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \frac{1}{\sqrt{D}} \sum_{\beta, \nu \neq 0} G_{\beta\nu} Q_\nu \frac{\delta}{\delta Q_\beta} \right] + \sum_{\gamma \neq 0} \left( \frac{S_{-\gamma}}{\sqrt{D}} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} + \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \frac{\delta}{\delta Q_{-\gamma}} \right) \tag{C.19}
\end{aligned}$$

uma vez que

$$\frac{S_{-\gamma}}{\sqrt{D}} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} + \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \frac{\delta}{\delta Q_{-\gamma}} = \frac{1}{\sqrt{D}} \frac{\delta}{\delta Q_{-\gamma}} \left( \sqrt{D} \frac{\delta}{\delta Q_\gamma} \right) \tag{C.20}$$

e

$$G_{\beta\nu} Q_\nu \frac{\delta}{\delta Q_\beta} = G_{\beta\nu} \frac{\delta Q_\nu}{\delta Q_\beta}, \tag{C.21}$$

desde que  $\sum_\beta G_{\beta\beta} = 0$ . Assim, obtém-se a equação (4.13).

## APÊNDICE D – Obtenção da Equação (4.15)

A energia total do sistema é dada por

$$E(y_n^0) = \sum_n \left[ \frac{1}{2R} (\Delta_1 y_n)^2 + V(y_n) \right], \quad (\text{D.1})$$

onde

$$\Delta_1 y_n = y_n - y_{n-1} \quad (\text{D.2})$$

denota a derivada primeira.

A equação de movimento estática é expressa por:

$$\frac{1}{R} (y_{n+1}^0 + y_{n-1}^0 - 2y_n^0) - \frac{\partial V(y_n^0)}{\partial y_n} = 0, \quad (\text{D.3})$$

e a equação (D.3) pode ser reescrita como:

$$\frac{1}{R} \Delta_2 y_n^0 - \frac{\partial V(y_n^0)}{\partial y_n} = 0, \quad (\text{D.4})$$

onde

$$\Delta_2 y_n^0 \equiv y_{n+1}^0 + y_{n-1}^0 - 2y_n^0 \quad (\text{D.5})$$

denota a derivada segunda.

Da equação (4.1), tem-se que:

$$y_n = y^0(n - \hat{x}_0) + \sum_{\alpha \neq 0}^{\infty} Q_\alpha \psi_\alpha(n - \hat{x}_0) \quad (\text{D.6})$$

ou ainda, pode-se escrever a equação (D.6) como:

$$y_n = y_n^0 + \lambda_n^\alpha, \quad (\text{D.7})$$

sendo

$$\lambda_n^\alpha = \sum_{\alpha \neq 0}^{\infty} Q_\alpha \psi_\alpha(n - \hat{x}_0). \quad (\text{D.8})$$

Substituindo a equação (D.8) em (4.14), obtém-se que:

$$\begin{aligned}
U &= \sum_n \left[ \frac{1}{2R} (\Delta_1 y_n^0 + \Delta_1 \lambda_n^\alpha)^2 + V[y_n^0 + \lambda_n^\alpha] \right] \\
&= \sum_n \left[ \frac{1}{2R} (\Delta_1 y_n^0)^2 + \frac{1}{R} (\Delta_1 y_n^0) (\Delta_1 \lambda_n^\alpha) + \frac{1}{2R} (\Delta_1 \lambda_n^\alpha)^2 + \right. \\
&\quad \left. + V[y_n^0] + \frac{dV}{dy_n} \Big|_{y_n^0} \lambda_n^\alpha + \frac{1}{2!} \frac{d^2V}{dy_n^2} \Big|_{y_n^0} (\lambda_n^\alpha)^2 + \dots \right], \tag{D.9}
\end{aligned}$$

em que  $V[y_n]$  foi expandido em torno de  $y_n^0$ .

Tem-se que

$$\begin{aligned}
(\Delta_1 y_n) (\Delta_1 \lambda_n^\alpha) &= (y_n - y_{n-1}) (\lambda_n^\alpha - \lambda_{n-1}^\alpha) \\
&= (y_n - y_{n-1}) \lambda_n^\alpha - (y_n - y_{n-1}) \lambda_{n-1}^\alpha \\
&= (y_n - y_{n-1}) \lambda_n^\alpha - (y_{n'+1} - y_{n'}) \lambda_{n'}^\alpha \\
&= (y_n - y_{n-1}) \lambda_n^\alpha - (y_{n+1} - y_n) \lambda_n^\alpha \\
&= (-y_{n+1} - y_{n-1} + 2y_n) \lambda_n^\alpha \\
&= -(y_{n+1} + y_{n-1} - 2y_n) \lambda_n^\alpha \\
&= -(\Delta_2 y_n) \lambda_n^\alpha \tag{D.10}
\end{aligned}$$

Assim, verifica-se a partir das equações (D.4) e (D.10) que o segundo e o quinto termo da equação (D.9) anulam-se. Logo,

$$\begin{aligned}
U &= \sum_n \left[ \frac{1}{2R} (\Delta_1 y_n^0)^2 + V[y_n^0] \right] + \sum_n \left[ \frac{1}{2R} (\Delta_1 \lambda_n^\alpha)^2 + \frac{1}{2!} \frac{d^2V}{dy_n^2} \Big|_{y_n^0} (\lambda_n^\alpha)^2 + \dots \right] \\
&= U[y_n^0] + \sum_n \left[ \frac{1}{2R} (\Delta_1 \lambda_n^\alpha)^2 + \frac{1}{2!} \frac{d^2V}{dy_n^2} \Big|_{y_n^0} (\lambda_n^\alpha)^2 + \dots \right]. \tag{D.11}
\end{aligned}$$

Então, obtém-se a equação (4.15).

## APÊNDICE E – Obtenção da Equação (4.16)

Tem-se que

$$\begin{aligned}
 (\Delta_1 \lambda_n^\alpha)^2 &= (\Delta_1 \lambda_n^\alpha)(\Delta_1 \lambda_n^\alpha) \\
 &= (\lambda_n^\alpha - \lambda_{n-1}^\alpha)(\lambda_n^\alpha - \lambda_{n-1}^\alpha) \\
 &= (\lambda_n^\alpha - \lambda_{n-1}^\alpha)\lambda_n^\alpha - (\lambda_n^\alpha - \lambda_{n-1}^\alpha)\lambda_{n-1}^\alpha \\
 &= (\lambda_n^\alpha - \lambda_{n-1}^\alpha)\lambda_n^\alpha - (\lambda_{n'+1}^\alpha - \lambda_{n'}^\alpha)\lambda_{n'}^\alpha \\
 &= (\lambda_n^\alpha - \lambda_{n-1}^\alpha)\lambda_n^\alpha - (\lambda_{n+1}^\alpha - \lambda_n^\alpha)\lambda_n^\alpha \\
 &= (-\lambda_{n+1}^\alpha - \lambda_{n-1}^\alpha + 2\lambda_n^\alpha)\lambda_n^\alpha \\
 &= -(\lambda_{n+1}^\alpha + \lambda_{n-1}^\alpha - 2\lambda_n^\alpha)\lambda_n^\alpha \\
 &= -(\Delta_2 \lambda_n^\alpha)\lambda_n^\alpha.
 \end{aligned} \tag{E.1}$$

Utilizando a equação (E.1) em (D.11), obtém-se:

$$U = U[y_n^0] + \frac{1}{2} \sum_n \left[ \lambda_n^{*\alpha} \left( -\frac{1}{R} \Delta_2 + \frac{d^2 V}{dy_n^2} \Big|_{y_n^0} \right) \lambda_n + \dots \right]. \tag{E.2}$$

Aplicando-se a equação (D.8) em (E.2), chega-se a equação (4.16).

## APÊNDICE F – Obtenção da Equação (4.18)

Multiplicando a equação (D.4) por  $\Delta_1 y_n^0$ , obtém-se:

$$-\frac{1}{R}(\Delta_1 y_n^0)(\Delta_1 y_n^0) + \frac{\partial V(y_n^0)}{\partial y_n} \Delta_1 y_n^0 = 0 \quad (\text{F.1})$$

$$-\frac{1}{2R} \Delta_1 (\Delta_1 y_n^0)^2 + \frac{\partial V(y_n^0)}{\partial y_n} \Delta_1 y_n^0 = 0 \quad (\text{F.2})$$

$$-\frac{1}{2R} (\Delta_1 y_n^0)^2 + V(y_n^0) = cte = 0 \quad (\text{F.3})$$

isto é,

$$\frac{1}{2R} (\Delta_1 y_n^0)^2 = V(y_n^0). \quad (\text{F.4})$$

Assim, da equação (D.1), tem-se que:

$$E[y_n^0] = \sum_n \left[ \frac{1}{2R} (\Delta_1 y_n^0)^2 + V[y_n^0] \right] = \sum_n \left[ V[y_n^0] + V[y_n^0] \right] \frac{1}{R}, \quad (\text{F.5})$$

ou seja,

$$M \equiv E[y_n^0] = \sum_n \left[ \frac{1}{2R} (\Delta_1 y_n^0)^2 + V[y_n^0] \right] = \frac{2}{R} \sum_n V[y_n^0], \quad (\text{F.6})$$

em que  $M$  é a massa do sóliton.

Pode-se reescrever a equação (D.15) como

$$U = M + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta \neq 0} Q_\alpha^* Q_\beta \left[ \sum_n \psi_\alpha^* \left( -\frac{1}{R} \Delta_2 + \frac{d^2 V}{dy_n^2} \Big|_{y_n^0} \right) \psi_\beta + \dots \right]. \quad (\text{F.7})$$

O termo entre parênteses na equação (D.22) é um operador diferencial de segunda ordem, que tem autovalores  $\omega_\beta$  e autovetores  $\psi_\beta(n - \hat{x}_0)$ , dados por

$$\left( -\frac{1}{R} \Delta_2 + \frac{d^2 V}{dy_n^2} \Big|_{y_n^0} \right) \psi_\beta(n - \hat{x}_0) = \omega_\beta^2 \psi_\beta(n - \hat{x}_0). \quad (\text{F.8})$$

Logo,

$$U = M + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta \neq 0} Q_\alpha^* Q_\beta \left[ \sum_n \psi_\alpha^* \omega_\beta \psi_\beta \right] + \dots, \quad (\text{F.9})$$

Entretanto, sabe-se que:

$$\sum_n \psi_\alpha^*(n - \hat{x}_0) \psi_\beta(n - \hat{x}_0) = \delta_{\alpha\beta}. \quad (\text{F.10})$$

Logo, descobre-se que a energia potencial total pode ser escrita pela equação (4.18).



## REFERÊNCIAS

- [1] SCHRODINGER, E. **O que é vida?: o aspecto físico da célula viva: Seguido de “Mente e matéria” e “Fragmentos autobiográficos”**. 1. ed. São Paulo: Unesp, 2007.
- [2] BRUSH, S. G. How Theories Became Knowledge: Morgan’s Chromosome Theory of Heredity in America and Britain. **Journal of the History of Biology**, v. 35, n. 3, p. 471–535, 2002.
- [3] AVERY, O. T. et al. Studies on the chemical nature of the substance inducing transformation of pneumococcal types. Induction of transformation by a desoxyribonucleic acid fraction isolated from pneumococcus type III. **Journal of Experimental Medicine**, v. 79, n. 2, p. 137–158, 1944.
- [4] WATSON, J. D.; CRICK, F. H. C. Molecular Structure of Nucleic Acids: A Structure for Deoxyribose Nucleic Acid. **Nature**, v. 171, p. 737–738, 1953.
- [5] SAENGER, W. **Principles of Nucleic Acid Structure**. 1. ed. Berlim: Springer, 1984.
- [6] CALLADINE, C. R. et al. **Understanding DNA: the molecule and how it works**. 3. ed. Londres: Elsevier Academic Press, 2004.
- [7] WARTELL, R. M.; BENIGHT, A. S. Thermal denaturation of DNA molecules: A comparison of theory with experiment. **Physics Reports**, v. 126, n. 2, p. 67–107, 1985.
- [8] PEYRARD, M.; BISHOP, A. R. Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation. **Physical Review Letters**, v. 62, p. 2755, 1989.
- [9] DAUXOIS, T.; PEYRARD, M.; BISHOP, A. R. Entropy-driven DNA denaturation. **Physical Review E**, v. 47, p. R44, 1993.
- [10] DAUXOIS, T.; PEYRARD, M. Entropy-driven transition in a one-dimensional system. **Physical Review E**, v. 51, p. 4027, 1995.
- [11] HOLSTEIN, T. D.; TURKEVICH, L. A. Field theory for the one-dimensional optical polaron. I. Incorporation of the Goldstone mode and interaction with internal phonons. **Physical Review B**, v. 38, p. 1901, 1988.
- [12] GERVAIS, J.-L.; SAKITA, B. Extended particles in quantum field theories. **Physical Review D**, v. 11, p. 2943, 1975.
- [13] GERVAIS, J. L.; JEVICKI, A.; SAKITA, B. Perturbation expansion around extended-particle states in quantum field theory. **Physical Review D**, v. 12, p. 1038, 1975.
- [14] CHRIST, N. H.; LEE, T. D. Quantum expansion of soliton solutions. **Physical Review D**, v. 12, p. 1606, 1975.
- [15] H.J.VEGA. Two-loop quantum corrections to the soliton mass in two-dimensional scalar field theories. **Nuclear Physics B**, v. 115, n. 3, p. 411–428, 1976.

- [16] RAJARAMAN, R. **Solitons and Instantons: An Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory**. 1. ed. Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1982.
- [17] BATISTETI, C. B.; ARAUJO, E. S. N. N.; CALUZ, J. J. Os experimentos de Griffith no ensino de Biologia: a transposição didática do conceito de transformação nos livros didáticos. **Revista Ensaio**, v. 12, n. 1, p. 83–100, 2010.
- [18] NETO, A. H. C.; CALDEIRA, A. O. Transport properties of solitons. **Physical Review E**, v. 48, p. 4037, 1993.
- [19] YAKUSHEVICH, L. V. **Nonlinear Physics of DNA**. 2. ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2004.
- [20] FERRER, A. V. **Dinâmica das excitações topológicas em sistemas magnéticos de baixa dimensionalidade**. 1999. 142 f. Unicamp. 1999.
- [21] R.B.INMAN; R.L.BALDWIN. Helix-random coil transitions in DNA homopolymer pairs. **Journal of Molecular Biology**, v. 8, n. 4, p. 452–469, 1964.
- [22] Department of Mathematics - John Scott Russell and the solitary wave. Disponível em: <<https://www.macs.hw.ac.uk/>>. Acesso em: 27 fev. 2021.
- [23] Quem foi Rosalind Franklin, a química que descobriu a estrutura do DNA. Disponível em: <<https://revistagalileu.globo.com/Ciencia/noticia/2020/04/quem-foi-rosalind-franklin-quimica-que-descobriu-estrutura-do-dna.html>>. Acesso em: 22 fev. 2022.