

СТІЙКІСТЬ СТОЯЧИХ ХВИЛЬ У НЕЛІНІЙНИХ ЛАНЦЮГАХ

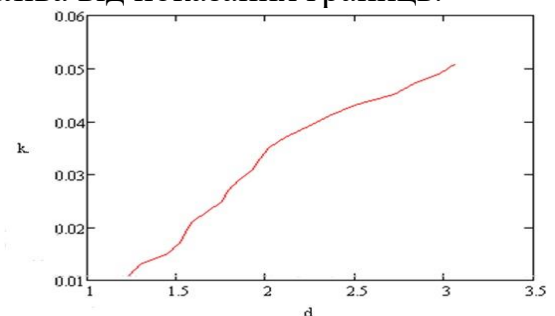
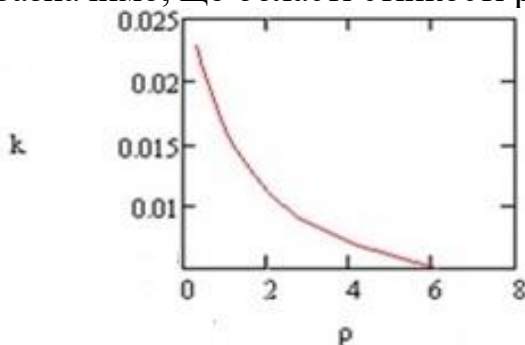
Голоскубова Н.С., Міхлін Ю.В.

*Національний технічний університет
«Харківський політехнічний інститут», м. Харків*

Важливим кроком проектування нанороботів є їх проектування на основі молекул ДНК, оскільки вони можуть бути використані як матеріал для створення нанооб'єктів. У даній роботі розглядається модель ДНК Peyrard-Bishop-Dauxois (модель PBD) [1]. Ця модель являє собою два ланцюжки жорстких дисків, пов'язаних один з одним поздовжніми та поперечними пружинами. Взаємодія протилежних дисків різних ланцюжків описуються потенціалом Морзе. Для найбільш адекватного опису взаємодії між сусідніми дисками кожного з ланцюжків вводиться ангармонійний потенціал взаємодії.

Метою даної роботи є дослідження на основі вказаної моделі стійкості локалізованих стоячих хвиль. Отримано границі локалізації цих хвиль у просторі параметрів системи.

Локалізовані стоячі хвилі збуджуються початковим зсувом або швидкістю деякого обраного диска (або осередку з двох протилежних дисків) в моделі PBD. Стійкість рішення аналізується чисельно-аналітичним підходом, який є наслідком відомого визначення Ляпунова щодо стійкості руху [2]. А саме, значення кінетичних енергій (або швидкості) вибраного диска та сусідніх елементів порівнюються. Нестійкість фіксується, якщо більш ніж 10 відсотків від початкової кінетичної енергії переходить в сусідні диски. Розрахунки проводяться в точках деякої обраної сітки у площині параметрів системи до тих пір, поки границі областей стійкості/нестійкості (в обраному масштабі) на цій площині не стабілізуються. Це є основним критерієм для вибору часу розрахунку. Результати розрахунків представлено на рис., де показані границі областей стійкості/нестійкості в площині параметрів системи: k – константа взаємодії між парами підстав уздовж кола, ρ – параметр ангармонізму, d – енергія дисоціації полінуклеотидних ланцюжків. Інші параметри системи зафіксовано. Зазначимо, що області стійкості розташовані зліва від показаних границь.



Література:

[1] Peyrard M. Nonlinear dynamics and statistical physics of DNA. *Nonlinearity*, 2004, Vol. 17, R1–R40.

[2] Yu. V. Mikhlina, T. V. Shmatko and G. V. Manucharyan. Lyapunov definition and stability of regular or chaotic vibration modes in systems with several equilibrium positions. *Computers and Structures*, 2004, 82, 2733–2742.