

اللَّهُ الرَّحْمَنُ الرَّحِيمُ

کلیه حقوق مادی مرتبط بر نتایج مطالعات، ابتکارات و  
نوآوری های ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه  
متعلق به دانشگاه رازی است.



پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک  
گرایش نظری

عنوان پایان نامه:

## سالیتون‌ها در DNA

استاد راهنما:

دکتر کیومرث منصوری

نگارش:

مهرنوش شفیعی

مهر ۹۲

تقديم به:

تشر

## چکیده

DNA یکی از جالبترین مولکول‌های بیولوژیک است. این مولکول متعلق به خانواده‌ای از بیوپلیمرهاست و دارای وظایف بیولوژیکی مهمی از جمله توانایی ذخیره و انتقال اطلاعات ژنتیک می‌باشد. در این پایان نامه سعی خواهیم کرد که از دیدگاه فیزیکی به مولکول DNA نگاه کنیم و بر این اساس باید آن را به عنوان سیستم دینامیکی پیچیده متشکل از تعداد زیادی اتم با ساختاری کم و بیش متقارن با درجات آزادی متعدد و انواع حرکات داخلی در نظر بگیریم. سیستم‌های غیر خطی برای توصیف گستره وسیعی از پدیده‌های علوم زیستی مانند علوم فیزیک استفاده می‌شود. در این پایان نامه با ارائه مدل‌های ریاضی غیر خطی برای مولکول DNA، معادلات دیفرانسیل غیر خطی حاکم بر آنها بدست آورده و جواب‌ها را به صورت تحلیلی و عددی بررسی خواهیم کرد.

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
	<b>فصل اول: DNA</b>
۲	۱-۱-۱ ساختار DNA .....
۲	۱-۱-۱-۱ ترکیب شیمیایی و ساختار اولیه .....
۵	۱-۱-۲ موقعیت فضایی و ساختار دوم .....
۶	۱-۱-۳ نیروهای پایدار کننده ساختار دوم .....
۶	۱-۳-۱-۱ برهم کنش‌های هیدروژنی .....
۸	۱-۳-۱-۲ برهم کنش‌های Stacking .....
۹	۱-۳-۳-۱ نیروهای دوربرد درون زنجیر و برون زنجیر .....
۹	۲-۱ پلی مورفیسم DNA .....
۱۱	۳-۱ گذارهای کنفورماسیون .....
۱۲	۱-۳-۱ گذار $B \rightarrow A$ .....
۱۲	۲-۳-۱ گذار $B \rightarrow Z$ .....
۱۳	۴-۱ دینامیک DNA .....
۱۳	۱-۴-۱ مقدمه .....
۱۴	۲-۴-۱ دینامیک بازها .....
۱۷	۳-۴-۱ دینامیک اسکلت قند-فسفات .....
	<b>فصل دوم: سالیتونها</b>
۲۱	۱-۲ مقدمه .....
۲۲	۲-۲ موج منفرد .....
۲۷	۳-۲ تاریخچه کشف سالیتونها .....
۳۰	۴-۲ معادله سینوسی - گوردن .....
۳۱	۵-۲ معادله Sinh-gordon .....
	<b>فصل سوم: تئوری خطی DNA</b>
۳۵	۱-۳ مدل‌های ریاضی اصلی .....
۳۵	۱-۱-۳ مدل خطی میله مانند .....
۳۶	۱-۱-۱-۳ دینامیک پیچشی و طولی: حالت گسسته .....
۳۸	۲-۱-۱-۳ دینامیک پیچشی و طولی: حالت پیوسته .....
۴۰	۳-۱-۱-۳ حرکات خمشی .....
۴۱	۲-۱-۳ مدل میله مانند دوگانه خطی .....
۴۲	۱-۲-۱-۳ حالت گسسته .....
۴۴	۲-۲-۱-۳ حالت پیوسته .....

- ۴۵-۲-۳- آمار تحریکات خطی.....
- ۴۵-۱-۲-۳- فونون‌ها در مدل میله مانند.....
- ۴۶-۱-۲-۳- جواب‌های عمومی معادلات مدل.....
- ۴۷-۲-۱-۲-۳- توابع همبستگی.....
- ۴۸-۳-۳- تئوری خطی و تجربیات آزمایشگاهی.....
- ۴۸-۱-۳-۳- قطبش‌زدایی فلوئورسانس.....
- ۴۹-۲-۳-۳- طیف فرکانس پائین.....

#### فصل چهارم: تئوری غیر خطی DNA

- ۵۳-۱- تئوری غیر خطی DNA: مدل‌های دینامیکی ایده آل.....
- ۵۳-۱-۱-۴- مدل سازی ریاضی غیر خطی: اصول کلی و محدودیت‌ها.....
- ۵۷-۲-۱-۴- مدل‌های غیر خطی میله مانند.....
- ۵۷-۱-۲-۱-۴- Muto مدل میله مانند.....
- ۵۸-۲-۲-۱-۴- Christiansen.....
- ۵۹-۳-۱-۴- مدل‌های میله‌ای دوگانه غیر خطی.....
- ۵۹-۱-۳-۱-۴- حالات کلی: هامیلتونی.....
- ۵۹-۲-۳-۱-۴- حالت کلی: معادلات دینامیکی.....
- ۶۰-۳-۳-۱-۴- مدل Y-.....
- ۶۰-۲- تئوری غیر خطی DNA: مدل‌های غیر ایده‌آل.....
- ۶۴-۱-۲-۴- اثرات محیط.....
- ۶۵-۱-۱-۲-۴- رویکرد کلی.....
- ۶۸-۲-۱-۲-۴- مثال‌های خاص.....
- ۷۰-۲-۲-۴- اثرات غیریکنواخت.....
- ۷۰-۱-۲-۷-۴- مرز.....
- ۷۵-۳-۲-۴- اثرات پیچشی.....

#### فصل پنجم: غیر خطی بودن و عملکرد مولکول DNA

- ۷۸-۱-۵- مکانیسم غیر خطی گذارهای کنفورماسیون.....
- ۷۹-۲-۵- امواج کنفورماسیون غیر خطی و اثرات دوربرد.....
- ۸۱-۳-۵- مکانیسم غیر خطی تنظیم فرآیند رونویسی.....
- ۸۳-۴-۵- جهت فرآیند رونویسی.....
- ۸۵-۵-۵- مدل غیر خطی دناتوره شدن DNA.....
- ۸۷- نتیجه گیری.....



## فهرست اشکال

- شکل ۱-۱: بازهای DNA ..... ۳
- شکل ۲-۱: یک رشته از زنجیره پلی نوکلئوتیدی ..... ۳
- شکل ۳-۱: مولکول DNA، پیوندهای هیدروژنی بین بازهای A و T و C و G ..... ۵
- شکل ۴-۱: جفت بازها A-T(a) و G-C(b) ..... ۵
- شکل ۵-۱: ساختار مارپیچ دو گانه ..... ۶
- جدول ۱-۱: مشخصات A, B و Z-DNA ..... ۱۱
- شکل ۶-۱: ساختار اسکلت ..... ۱۱
- شکل ۷-۱: پورین و پیریمیدین بصورت دو صفحه‌ی مستطیلی ..... ۱۴
- شکل ۸-۱: چرخش بین جفت بازها ..... ۱۵
- شکل ۹-۱: انتقال درونی جفت بازها ..... ۱۵
- شکل ۱۰-۱: چرخش درون جفت بازها ..... ۱۶
- شکل ۱۱-۱: جابجایی درون بازها ..... ۱۶
- شکل ۱۲-۱: زوایای چرخشی ..... ۱۷
- شکل ۱۳-۱: کنفورماسیون‌های مختلف قند ..... ۱۸
- شکل ۱۴-۱: تغییر انرژی آزاد نوکلئوزید ..... ۱۹
- شکل ۱-۲: برخورد ۲ موج سالتیونی و عبور آنها از میان یکدیگر ..... ۲۲
- شکل ۲-۲: موج سینوسی (a) و موج منفرد (b) ..... ۲۳
- شکل ۳-۲: پاشندگی موج منفرد ..... ۲۵
- شکل ۴-۲: اثر مشخصه‌های غیرخطی انتشار موج ..... ۲۶
- شکل ۵-۲: نمونه‌ای از آزمایش راسل در پی کشف امواج منفرد ..... ۲۷
- شکل ۶-۲: پارامترها و متغیرهای استفاده شده در توصیف امواج ..... ۲۸
- شکل ۷-۲: امواج بلندتر سریعتر از امواج کوتاهتر حرکت می‌کنند ..... ۲۸
- شکل ۸-۲: نمودار تابع sinh-gordon به ازای tهای داده شده ..... ۳۳
- شکل ۱-۳: (a) مدل میله ارتجاعی و (b) آنالوگ منقطع آن ..... ۳۶
- جدول ۱-۳: سرعت امواج طولی ( $V_1$ ) و پیچشی ( $V_2$ ) در DNA ..... ۴۰
- شکل ۲-۳: تصویر شماتیک از دو شاخه آکوستیک در طیف DNA ..... ۴۰
- شکل ۳-۳: تصویر شماتیک از دو شاخه آکوستیک (۳) مربوط به ارتعاشات خمشی با فرکانس  $W_b$  ..... ۴۱
- شکل ۴-۳: (a) مدل خطی دوگانه میله‌مانند و (b) آنالوگ منقطع آن ..... ۴۲
- شکل ۱-۴: (a) تصویر شماتیک از kink-soliton معادله Sine-Gordon. (b) وضعیت باز DNA ..... ۴۲
- شکل ۲-۴: مدل مکانیکی Scott ..... ۵۵
- شکل ۳-۴: مدل مکانیکی اصلاح شده: دو زنجیره از پاندرل‌های جفت شده با هم ..... ۵۶
- شکل ۴-۴: سطح مقطع یک جفت از دیسک‌ها ..... ۶۲

- شکل ۴-۵: دو شاخه از ارتعاشات پیچشی DNA ..... ۶۳
- شکل ۴-۶: مرز بین دو بلوک ..... ۷۱
- شکل ۴-۷: زنجیره دوگانه A-T شامل بلوک C-G ..... ۷۳
- شکل ۴-۸: زنجیره دوگانه که دارای بلوک A-T ..... ۷۳
- شکل ۵-۱: (a) گذار  $A \rightarrow B$  (b) جواب شبه kin ..... ۷۹
- شکل ۵-۲: بیانی شماتیک از برهم کنش های مولکول ها ..... ۸۰
- شکل ۵-۴: فرآیند رونویسی ..... ۸۲
- شکل ۵-۵: شمای یک رشته DNA ..... ۸۳
- شکل ۵-۶: تصویر شماتیک دناتوره شدن ..... ۸۵
- شکل ۵-۷: جابه جایی های  $(v_n, u_n)$  بازها ..... ۸۶

## فهرست جداول

- جدول ۱-۱: مشخصات A-DNA و Z-DNA و B-DNA ..... ۱۱
- جدول ۱-۳: سرعت امواج طولی ( $V_l$ ) و پیچشی ( $V_t$ ) در DNA ..... ۳۹

# فصل اول

DNA

## ۱-۱- ساختار DNA

### ۱-۱-۱- ترکیب شیمیایی و ساختار اولیه

دئوکسی ریبونوکلئیک اسید (DNA) یکی از جالبترین مولکول‌های بیولوژیک است. این مولکول متعلق به خانواده‌ای از بیوپلیمرهاست و دارای وظایف بیولوژیکی مهمی از جمله توانایی ذخیره و انتقال اطلاعات ژنتیک می‌باشد. در این پایان نامه سعی خواهیم کرد که از دیدگاه فیزیکی به مولکول DNA نگاه کنیم و بر این اساس بایستی آن را به عنوان یک سیستم دینامیکی پیچیده متشکل از تعداد زیادی اتم با ساختاری کم و بیش متقارن، با درجات آزادی متعدد، انواع حرکات داخلی و توزیع ویژه نیروهای داخلی در نظر بگیریم. در این فصل رویکردهای اصلی و ساختار DNA را بطور مختصر توضیح خواهیم داد.

دئوکسی ریبونوکلئیک اسید یا به اختصار DNA از دو رشته پلیمر خطی تشکیل شده است که هر رشته متشکل از واحدهای مونومری نوکلئوتید می‌باشد (شکل ۱-۱)، که این نوکلئوتیدها بوسیله پیوندهای فسفودی استر به یکدیگر متصل هستند [۱۱]. هر نوکلئوتید به عنوان واحدهای سازنده DNA، خود از سه بخش اصلی تشکیل شده است:

۱- گروه فسفات که دارای بار منفی می‌باشد.

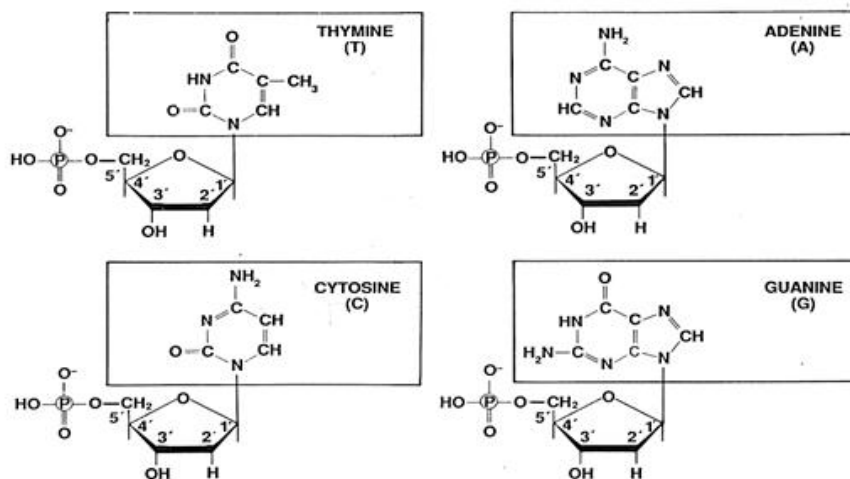
۲- قند پنج کربنی حلقوی ریبوز<sup>۱</sup> و دئوکسی ریبوز<sup>۲</sup>.

۳- باز آلی نیتروژن دار پورینی<sup>۳</sup> و پیریمیدینی<sup>۴</sup>.

قند موجود در ساختمان مولکول DNA دئوکسی ریبوز است. در حقیقت قند دئوکسی ریبوز فاقد گروه هیدروکسیل روی کربن شماره ۲' است. بازها به عنوان بخشی از مولکول DNA چهار نوع مختلف دارند و به دو دسته پورین و پیریمیدین تقسیم می‌شوند؛ آدنین (A)، تیمین (T)، سیتوزین (C) و گوانین (G) بازهایی هستند که در ساختار نوکلئوتیدها بکار رفته‌اند که آدنین و گوانین از خانواده پورین‌ها و سیتوزین و تیمین از خانواده پیریمیدین‌ها می‌باشند.

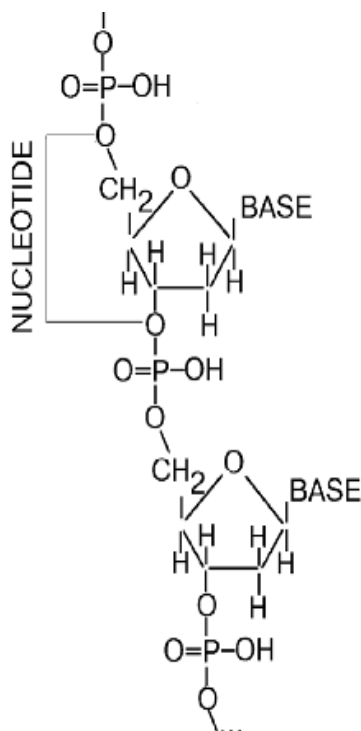
---

<sup>۱</sup> . Ribose  
<sup>۲</sup> . Deoxyribose  
<sup>۳</sup> . Purine  
<sup>۴</sup> . Pyrimidine



شکل ۱-۱: بازهای DNA

همانطور که در شکل (۱-۱) نشان داده شده است پورین‌ها و پیریمیدین‌ها از لحاظ ساختاری با یکدیگر متفاوتند. پیریمیدین‌ها جزء بازهای تک حلقه‌ای هستند در حالیکه پورین‌ها در ساختار خود دو حلقه آروماتیک دارند.



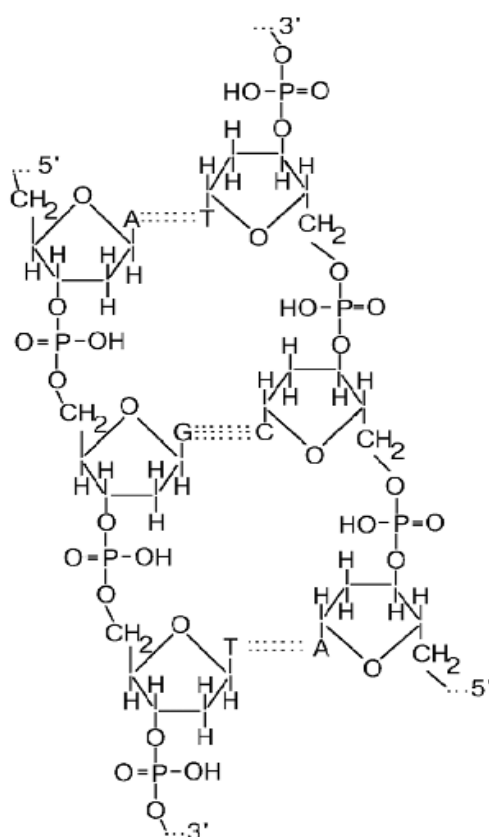
شکل ۲-۱: یک رشته از زنجیره پلی نوکلئوتیدی

هر یک از پلی‌مرهایی که اغلب به آن رشته می‌گویند بوسیله قطبیت آنها و توالی قرار گرفتن بازها مشخص می‌شود. همین توالی قرار گرفتن بازهاست که اطلاعات ژنتیکی را حمل می‌کند. سرانجام دو رشته در کنار همدیگر قرار می‌گیرند و یک مولکول DNA را می‌سازند. آرایش آنها بگونه‌ای است که:

\* رشته‌ها نسبت به یکدیگر موازی ولی قطبیت آنها متفاوت است یعنی یک رشته دارای انتهای ۳' - دارای بار منفی و دیگری انتهای ۵' - دارد (شکل ۱-۳).

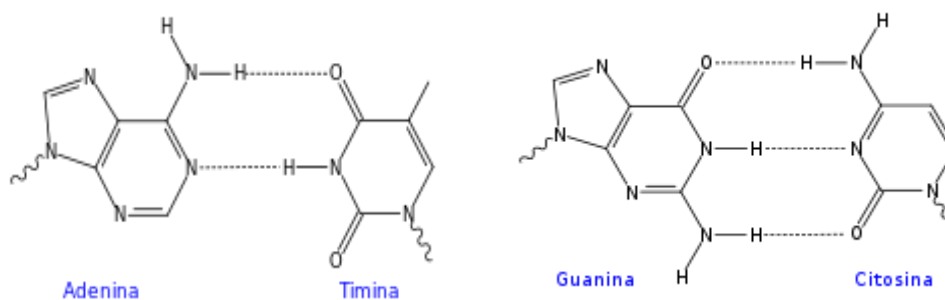
\* بازها در میان ۲ رشته قرار گرفته‌اند و بوسیله‌ی پیوندهای هیدروژنی ضعیفی به یکدیگر متصل هستند [۱۶].

\* دو باز متصل شده با پیوند هیدروژنی ایجاد یک جفت باز<sup>۱</sup> می‌کنند و بر طبق قانون چارگف<sup>۲</sup> تنها دو نوع جفت باز در DNA وجود دارد: A-T و G-C (شکل ۱-۴).



شکل ۱-۳: مولکول DNA، پیوندهای هیدروژنی بین بازهای A و T و C و G بوسیله‌ی نقطه چین نشان داده شده است.

۱ . base Pair  
۲ . Chargaff



شکل ۱-۴: جفت بازها A-T(a) و G-C(b)

بنابراین مولکول DNA ساختار شیمیایی نسبتاً منظمی دارد. بخش منظم بوسیله‌ی تناوب گروه‌های قند و فسفات ایجاد می‌گردد و بخش نامنظم بوسیله‌ی بازهای متصل به قند بوجود می‌آید و در طول زنجیره ایجاد یک توالی می‌کند. این توالی است که ساختار اولیه‌ی مولکول DNA را ایجاد می‌کند. توالی بازها در زنجیره‌ی پلی نوکلئوتیدی برای هر موجود منحصر به فرد است و هر گونه تغییر در این توالی می‌تواند منجر به تغییراتی شگرف در خصوصیات و عملکرد موجود زنده داشته باشد.

### ۱-۲-۱- موقعیت فضایی و ساختار دوم

در سال ۱۹۵۳ با استفاده از پراکندگی اشعه رونتگن (ایکس) جیمز واتسون و فرانسیس کریک بطور همزمان به ساختار فیزیکی مولکول DNA پی بردند. و در سال ۱۹۶۲ واتسون و کریک به خاطر اهمیت کشف ساختمان DNA بطور مشترک جایزه نوبل دریافت کردند [۶, ۴۳]. ویژگی‌های اصلی این ساختارها به شرح زیر است:

\* دو زنجیره‌ی پلی نوکلئوتیدی حول یک محور مشترک پیچیده‌اند تا یک مارپیچ دوگانه را ایجاد کنند (شکل ۱-۵).

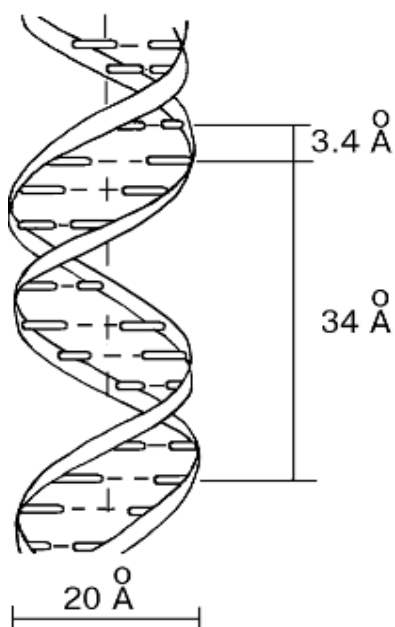
\* قطر مارپیچ ۲۰ Å است. بازهای مجاور با فاصله ۳/۴ Å در طول مارپیچ قرار گرفته‌اند و نسبت به یکدیگر زاویه‌ی ۳۶ درجه دارند. طوری که در هر دور کامل مارپیچ به طول ۳۴ Å، ده نوکلئوتید (پنج جفت باز) قرار گرفته است.

\* بازها در داخل و قند و فسفات در خارج مارپیچ قرار دارند.

\* دو زنجیره‌ی پلی نوکلئوتیدی بوسیله‌ی پیوندهای هیدروژنی بین بازها در کنار هم نگه داشته شده‌اند طوری که در (شکل ۱-۳) نشان داده شده است. بازها در قالب جفت‌هایی (شکل ۱-۴) به هم پیوسته‌اند طوری که یک باز از رشته با یک باز رشته‌ی مقابل، پیوند هیدروژنی ایجاد نموده است.



\* تنها جفت بازهای خاصی امکان پذیرند: یکی از دو باز بایستی از پورین‌ها و دیگری از پیریمیدین‌ها باشد (شکل ۱-۴). به علت همین نحوه‌ی خاص جفت شدن بازهاست که زنجیره‌ها مکمل یکدیگرند. این توصیف کلاسیک از ساختار دوم DNA بعدها کامل‌تر و اختصاصی‌تر شد [۳۱].



شکل ۱-۵: ساختار مارپیچ دو گانه است. اسکلت قند- فسفات نوار نشان داده شده است. بازها بصورت میله‌های کوتاه متقاطع نشان داده شده‌اند.

### ۱-۳-۱-۱- نیروهای پایدارکننده ساختار دوم

برای فهم خصوصیات فیزیکی مولکول DNA لازم است که درک روشنی از برهم کنش‌های بین گروه‌های اتمی اصلی داشته باشیم. مهم‌ترین آنها نیروهای پایدارکننده ساختار دوم DNA یعنی برهم کنش‌های افقی یا پیوند هیدروژنی بین جفت بازها و برهم کنش‌های عمودی یا Stacking بین بازهای مجاور در امتداد محور DNA و نیروهای درون و برون اسکلتی می‌باشد.

#### ۱-۳-۱-۱-۱- برهم کنش‌های هیدروژنی

پیوند هیدروژنی که نوعی برهم کنش دو قطبی- دو قطبی قوی است از جمله مهم‌ترین برهم کنش‌های بین مولکولی به شمار می‌آید. پیوند هیدروژنی را می‌توان نیروی جاذبه‌ی الکتروستاتیکی دانست که میان اتم

هیدروژن متصل به یک اتم الکترونگاتیو و اتم الکترونگاتیو دیگری که در مجاورت آن قرار دارد برقرار می‌شود. بطور کلی برهم کنش‌های هیدروژنی به شکل زیر می‌باشند.



که در آنها اتم هیدروژن به دو اتم الکترونگاتیو X و Y متصل است. کشیدگی پیوند در نتیجه‌ی طول آن، وابسته به بار الکتریکی اتم‌های X، Y و H است.

در یک طرح کلی یک جفت باز در DNA، پروتون‌ها بین گروه‌های NH به عنوان دهنده‌ی الکترون از یک باز و N یا O به عنوان پذیرنده از باز دیگر مبادله می‌شوند. بنابراین در DNA پیوندهای هیدروژنی از دو نوعند:



پیوند هیدروژنی طبیعت الکتروستاتیک دارد در مولکول‌های DNA دو رشته‌ای، جفت شدن دو رشته از طریق پیوندهای هیدروژنی بین بازهای آلی صورت می‌گیرد. این پیوندهای هیدروژنی که پیوند هیدروژنی واتسون و کریک<sup>۱</sup> نامیده می‌شوند بین حلقه‌ی پیریمیدینی در بازهای پورینی و بازهای پیریمیدینی تشکیل می‌شود. جفت باز A-T دارای دو پیوند هیدروژنی و جفت باز C-G دارای سه پیوند هیدروژنی می‌باشند (شکل ۱-۴). برای تشکیل چنین پیوندهای هیدروژنی، یکی از بازهای آلی نسبت به دیگری باید ۱۸۰ درجه دچار چرخش شود. بنابراین دو رشته‌ی DNA نسبت به هم، بصورت موازی غیر همسو<sup>۲</sup> می‌شوند. اگرچه پیوندهای هیدروژنی ضعیف‌اند و چندان جهت‌دار نیستند [۴۱]. ولی نقش مهمی در ایجاد پایداری در جفت شدن بازها در مدل واتسون- کریک و در نتیجه نقش کلیدی در کد کردن اطلاعات ژنتیکی در فرآیندهای رونویسی و همانندسازی دارند. نتایج محاسبات شیمی- کوانتومی نشان می‌دهد که سه نوع نیرو در این پیوندها شرکت دارند: نیروهای الکتروستاتیک، قطبش و پراکندگی (پاشیدگی) محاسبات انرژی کل پیوندهای هیدروژنی نتایج زیر را در مورد جفت باز A-T بدست می‌دهد [۲۲]:

$$E_{A-T} = 7/00 \quad KCal / Mol \quad (4-1)$$

و برای جفت باز C-G:

$$E_{C-G} = 16/79 \quad KCal / Mol \quad (5-1)$$

<sup>۱</sup> . Watson & Crick Pairing  
<sup>۲</sup> . Anti Parallele

معمولاً انرژی پیوندهای هیدروژنی ۲۰ تا ۳۰ بار ضعیف تر از انرژی پیوندهای کووالانسی است. با مثالی این ادعا را تأیید می‌کنیم، انرژی پیوندهای کووالانسی C-C و C-H [۷۱] و انرژی یک پیوند هیدروژنی OH...H را در نظر می‌گیریم:

$$E_{C-C} = 83/1 \quad KCal / Mol \quad ; \quad E_{C-H} = 98/8 \quad KCal / Mol \quad (6-1)$$

$$E_{O-H...O} = 3-6 \quad KCal / Mol \quad (7-1)$$

می‌بینیم که تفاوت بین این دو انرژی بسیار زیاد است.

همچنین تفاوت قابل توجهی هم در استحکام این دو نوع پیوند وجود دارد. برای توضیح آن می‌توانیم به مقایسه انرژی،  $e$ ، لازم برای کشیدن پیوندها تا  $0.1 \text{ \AA}$  پردازیم. برای پیوندهای کووالانسی داریم:

$$e_{C-C} = 3/25 \quad KCal / Mol \quad ; \quad e_{C-H} = 3/60 \quad KCal / Mol \quad (8-1)$$

و برای یک پیوند O-H...O داریم:

$$e_{O-H...O} = 0/1 \quad KCal / Mol \quad (9-1)$$

بنابراین پیوندهای کووالانسی بسیار مستحکم‌ترند. از طرف دیگر پیوندهای هیدروژنی بین جفت بازها به راحتی در دماهای فیزیولوژیک بوسیله‌ی انواع عوامل شیمیایی و پارامترهای فیزیکی در مقادیر و غلظت‌های رایج در سیستم‌های بیولوژیک قابل شکستن هستند.

### ۱-۱-۲-۳- برهم کنش‌های Stacking

برهم کنش‌های Stacking نیروهای دیگری هستند که ساختار DNA را پایدار می‌کنند [۱۸, ۱۲]. آنها یک باز را بر روی باز دیگر نگه می‌دارند و لایه‌هایی از بازها را می‌سازند. در برهم کنش‌های Stacking، برهم کنش‌های دوقطبی- دوقطبی، سیستم‌های الکترون‌های  $\pi$ ، نیروهای پراکندگی لاندن (در محلول‌های آبی) حضور دارند. این نیروها در غالب یک الگوی برهم کنش پیچیده بین جفت بازهای مجاور هم و در فاصله‌ای نزدیک به  $3.4 \text{ \AA}$  در ماریچ دوگانه‌ی DNA طبیعی ایجاد می‌گردند. مشابه پیوندهای هیدروژنی، نیروهای Stacking هم به دما، ثابت دی‌الکتریک محیط و سایر پارامترهای بیرونی که بطور خلاصه پارامترهای محیطی نام دارند، بستگی دارند. نیروهای Stacking وابسته به توالی بازها می‌باشند [۹, ۱۴].

انرژی کل برهم کنش‌های Stacking بین انواع مختلف جفت بازها عبارت است از [۲۶]:

$$E_{\substack{C-G \\ G-C}} = 14/59 \quad KCal / Mol \quad ; \quad E_{\substack{T-A \\ A-T}} = 6/57 \quad KCal / Mol$$

$$E_{\substack{G-C \\ C-G}} = 10/5 \quad KCal / Mol \quad ; \quad E_{\substack{T-A \\ A-T}} = 6/57 \quad KCal / Mol$$

$$E_{\substack{C-G \\ T-A}} = 9/81 \quad KCal / Mol \quad ; \quad E_{\substack{G-C \\ A-T}} = 6/78 \quad KCal / Mol \quad (10-1)$$

$$E_{\substack{G-C \\ C-G}} = 9/69 \quad KCal / Mol \quad ; \quad E_{\substack{A-T \\ A-T}} = 5/37 \quad KCal / Mol$$

$$E_{\substack{G-C \\ G-C}} = 8/26 \quad KCal / Mol \quad ; \quad E_{\substack{A-T \\ T-A}} = 3/82 \quad KCal / Mol$$

بنابراین هر چه غلظت جفت‌های G-C بیشتر باشد برهم کنش‌های Stacking پایدارتر از حالتی خواهند بود که غلظت بالای جفت بازهای A-T را داشته باشیم. حال اگر انرژی برهم کنش‌های Stacking را با پیوندهای هیدروژنی مقایسه کنیم، متوجه می‌شویم با مقادیر یکسانی روبرو هستیم. از طرفی مقایسه این برهم کنش‌ها با پیوندهای کووالانسی حکایت از ضعف بودن آنها دارد.

### ۱-۳-۳-۱- نیروهای دوربرد درون زنجیر و برون زنجیر

این نیروها اساساً به حضور گروه‌های فسفات وابسته‌اند. فاصله بین فسفات‌ها در دو رشته حدود  $20 \text{ \AA}$  است. بنابراین برهم کنش‌های ضعیفی بین آنها وجود دارد. در مقابل در طول یک رشته، فاصله فسفات‌ها می‌تواند تا  $5 \text{ \AA}$  باشد که مفهوم آن این است که دافعه‌ی متقابل بین آنها می‌تواند خیلی قوی باشد. ولی در فرم مارپیچ دوگانه طبیعی، DNA باید در محیطی نگه داشته شود که دارای کمترین قدرت یونی باشد. گروه‌های فسفات بوسیله‌ی یونهای مخالف محیط پوشیده می‌شوند. این پوشیدگی بسیار پایدار است طوری که اگر غلظت NaCl محیط از  $0.5 \text{ Mm}$  به  $0.5 \text{ M}$  تغییر کند، تعداد یونهای  $\text{Na}^+$  که گروه‌های فسفات را پوشانده‌اند ثابت می‌ماند زیرا بطور متوسط هر گروه فسفات بوسیله‌ی  $0.88 \text{ Na}^+$  در این محدوده‌ی غلظت یونی پوشیده می‌شود. پارامترهای محیطی (pH، بار یونها) در محدوده‌ی فیزیولوژیک می‌توانند این پوشیدگی یونی را تغییر دهند و ساختارهای گذار مارپیچ دوگانه می‌تواند بطور گسترده فاصله‌ی بین فسفات‌ها را تغییر دهد.

### ۱-۲- پلی مورفیسم

مولکول DNA اگرچه ساختمان دو رشته‌ای مارپیچی ثابتی دارد ولی اشکال فضایی متفاوتی به خود می‌گیرد. این اشکال فضایی تا حد زیادی به ترکیب بازی DNA وابسته است و فعلاً تصور بر اینست که این اشکال مختلف فضایی ممکن است در تنظیم بیان ژن نقش داشته باشند. زیرا تغییر شکل فضایی DNA باعث تغییر میزان میل ترکیبی پروتئین‌های تنظیم کننده‌ی DNA می‌شود.

اشکال فضایی مختلف DNA بوسیله‌ی کریستالوگرافی اشعه X مشخص شده است. این بررسی‌ها وابستگی اشکال مختلف DNA و شرایط فیزیولوژیک محیط اثبات کرده است. بیشترین شکل فضایی یافت شده DNA که بوسیله‌ی واتسون و کریک شرح داده شده است DNA نوع B است. بطور کلی هر مارپیچ DNA را با پارامترهای زیر میتوان توصیف کرد:

(۱) P یا Pitch که از فرمول زیر محاسبه می‌شود:

$$P = nh \quad (1-1)$$

که طول یک دور کامل به موازات محور طولی مارپیچ دو رشته‌ای است و در آن n تعداد نوکلئوتیدها در هر دور و h فاصله‌ی نوکلئوتیدهای مجاور در راستای محور مارپیچ است.