

Project Code TRG5680016

Project Title An Elastic Model of a Single DNA Molecule Subjected to Thermal Induced Stress

Investigator Miss Monrudee Liangruksa, National Nanotechnology Center

E-mail Address monrudee@nanotec.or.th

Project Period 2.5 years

ABSTRACT

Single-molecular experimental studies of DNA (deoxyribonucleic acid) coupled with molecular modeling and simulation have confirmed the remarkable DNA's conformation in response to stresses. The conformation in terms of twisting and bending of DNA can basically affect to the cell cycle and gene regulation. Among different environmental factors, heat is an important one in determining the normal biological development. Changes in temperature can also influence lipid fluidity, nucleic acid conformation, protein flexibility, and important regulatory consequences. In the case that DNA is mistakenly structured or packed, it can lead to diseases or deformities such as neurodegenerative diseases, autoimmune diseases, and perhaps several types of cancer.

Since elastic rod modeling can serve as a fast and convenient tool to compute the structure and dynamics of DNA, we propose to use it to investigate the elasticity of a DNA molecule under thermal induced stress based on the model namely, Kirchhoff's model. We develop the elastic model consisting of thermal induced stress coupled into the equations. The problems are solved by perturbation method to find equilibrium configurations of DNAs and the different unstable modes that can be excited in different regions due to temperature changes. The results from this finding will provide us the critical values of the parameters that lead to the instability and resulting DNA's structures. Furthermore this analytical study of entropic elasticity of DNA could be a groundwork leading to better understandings of the influence of its deformation under thermal induced stress on biological processes in living cells. It may also have engineering implications in designing a DNA- based functional nanodevice.

Keywords: Elastic model; DNA; Thermal induced stress; DNA deformation

รหัสโครงการ TRG5680016
ชื่อโครงการ แบบจำลองยืดหยุ่นของดีเอ็นเอภายใต้ความเครียดเหนี่ยวนำเชิงอุณหภูมิตั้ง
ชื่อนักวิจัย นางสาวมนฤดี เลี้ยงรักษา ศูนย์นาโนเทคโนโลยีแห่งชาติ
อีเมล monrudee@nanotec.or.th
ระยะเวลาโครงการ 2.5 ปี

บทคัดย่อ

การศึกษาโครงสร้างของดีเอ็นเอด้วยการทดลองและการสร้างแบบจำลองเชิงโมเลกุลได้แสดงถึงการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างของดีเอ็นเอเพื่อตอบสนองต่อความเครียดในรูปแบบต่างๆ การเปลี่ยนแปลงเหล่านี้ในรูปแบบของการบิดหรือโค้งงอของดีเอ็นเอสามารถส่งผลต่อวัฏจักรของเซลล์และการควบคุมการแสดงออกของยีนส์ จากหลากหลายปัจจัยจากสิ่งแวดล้อม พบว่าความร้อนเป็นตัวแปรสำคัญที่ควบคุมการพัฒนาเชิงชีววิทยาให้เป็นไปอย่างปกติ การเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิยังส่งผลต่อสมบัติเชิงของไหลของไขมัน การเปลี่ยนแปลงรูปร่างของดีเอ็นเอ ความยืดหยุ่นของโปรตีน และการควบคุมการแสดงออกของยีนส์ที่สำคัญ ในกรณีที่ดีเอ็นเอมีการวางตัวหรือจัดเรียงอย่างผิดปกติ จะสามารถนำไปสู่โรคหรือความพิการ ได้แก่ โรคที่เกิดจากความผิดปกติของระบบประสาท โรคภูมิคุ้มกันทำลายตนเอง และแม้กระทั่งโรคมะเร็งชนิดต่างๆ

เนื่องจากการศึกษาความยืดหยุ่นและความเสถียรทางโครงสร้างของดีเอ็นเอมีความสำคัญอย่างมาก เราจึงได้นำเสนอการศึกษาเชิงกลของโมเลกุลดีเอ็นเอภายใต้ความเครียดที่เกิดจากอุณหภูมิโดยใช้แบบจำลองเคอร์ซอฟฟ์ ของแท่งบางยืดหยุ่น (Kirchhoff's model of a thin elastic rod) เพราะเป็นวิธีที่สะดวกและรวดเร็วในการคำนวณหาโครงสร้างและการเปลี่ยนแปลงของดีเอ็นเอภายใต้ความเครียด ในการศึกษาจะใช้วิธี perturbation ในการแก้ปัญหาและคำนวณหาลักษณะของดีเอ็นเอที่โหมดต่างๆ ภายใต้อุณหภูมิที่เปลี่ยนแปลงไป ผลที่ได้จะสามารถช่วยให้เราเข้าใจถึงค่าของตัวแปรที่นำไปสู่ความไม่เสถียรและโครงสร้างที่เปลี่ยนไป นอกจากนั้นการศึกษาในเชิงวิเคราะห์จะเป็นงานพื้นฐานที่นำไปสู่ความเข้าใจที่มากขึ้นของอิทธิพลของความเครียดเหนี่ยวนำเชิงอุณหภูมิต่อการเปลี่ยนแปลงรูปร่างของดีเอ็นเอและต่อกระบวนการเชิงชีววิทยาในสิ่งมีชีวิต สำหรับในด้านวิศวกรรม เราจะสามารถประยุกต์ความรู้ที่ได้ในการออกแบบอุปกรณ์นาโนที่มีพื้นฐานจากดีเอ็นเอ

คำหลัก : แบบจำลองยืดหยุ่น; ดีเอ็นเอ; ความเครียดเหนี่ยวนำเชิงอุณหภูมิตั้ง; การเปลี่ยนแปลงรูปร่างของดีเอ็นเอ