

Fonones en el ADN: una aplicación de cadenas semialeatorias

S. C. Gómez C.^{1,*} y R. R. Rey-González^{1,†}

¹ Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, D. C.

Resumen

Los recientes desarrollos de la nanoelectrónica han impulsado el estudio de sistemas como el ADN y sus aplicaciones en el desarrollo de nuevos dispositivos. En el siguiente trabajo presentamos un modelo que nos permite estudiar, en una forma muy sencilla, las propiedades vibracionales del ADN. Para esto se modela el ADN como una cadena lineal de dos constantes de fuerza y cuatro masas en la celda unidad. Se analiza el comportamiento de cadenas ordenadas y desordenadas. En este último caso se encuentran resultados compatibles con un carácter diatómico del sistema.

Palabras claves: Fonones, ADN, Cadena desordenada, funciones de Green

Abstract

The last developments of nanoelectronics have encouraged the study of systems such as DNA and its applications to new devices. In this work we present a model in order to study the vibrational properties of DNA. We use a lineal chain with two constant forces and four mass per unit cell. Ordered and disordered situations are considered. We find a diatomic behavior for disordered chain.

1. Introducción

Desde 1869 la biología comienza el estudio por un nuevo compuesto hallado en el interior del núcleo de las células. Este compuesto que tiene forma de cinta enrollada es el conocido ADN. En 1944 Chargaff luego de diferentes procesos químicos aísla las cuatro bases que componen la estructura: Adenina, A, timina, T, citosina, C y guanina, G (Leyes de Chargaff). Las cuales tienen una única manera de unión entre ellas; adenina con timina ($A=T$) y guanina con citosina ($G=C$). En 1951 Linus Pauling publica una propuesta para la estructura de ADN la cual tiene como fundamento tres hilos entrelazados de las bases componentes [1], sin embargo su modelo aunque parecía explicar las placas

*- scgomezca@unal.edu.co

†- rrreyg@unal.edu.co

de rayos X, presentó inconsistencias químicas. En 1953 en la revista Nature aparece un modelo de ADN con estructura en doble hélice, este fue el resultado de los estudios que Watson y Crick obtuvieron luego de conocer la propuesta realizada por Pauling [2].

De otra parte, los recientes desarrollos en la miniaturización de los dispositivos electrónicos ha fomentado el estudio de sistemas nanométricos para encontrar alambres lo más pequeños, sensibles y estables que permitan una mayor concentración de dispositivos. En esta ardua tarea los investigadores están estudiando cadenas de ADN como fuertes candidatos para ser usadas en la no lejana industria nano-electrónica [3, 4]. Actualmente existe una gran controversia sobre las características eléctricas del ADN las cuales van desde un comportamiento tipo aislante hasta de superconductor, debido a los resultados encontrados que no son concluyentes a este respecto [5, 6, 7].

Con el objeto de colaborar en una mejor comprensión de este sistema, el cual ofrece entre otras posibilidades el auto-ensamblaje y la auto-duplicación, en este trabajo presentamos un modelo que nos permite analizar las propiedades vibracionales del ADN, las cuales deben influir en sus propiedades electrónicas. El ADN como sistema físico se estudia en la sección dos, mientras en la tercera sección presentamos las bases teóricas del modelo, los resultados son presentados en la cuarta sección.

2. Sistema físico

Ya se ha dicho que la cadena de ADN está formada por bases más exactamente de nucleótidos, los cuales son la unión de una base, un azúcar y un fosfato. Las bases se unen entre si por medio de puentes de hidrógeno. Para los diferentes estudios químicos y físicos que se realizan el ADN se modela como cadenas lineales. Las cadenas más usadas que se hallan en la literatura están compuestas por pares de nucleótidos representados por un sitio en la cadena. Recordando la organización del ADN tenemos así una cadenas diatómicas [8, 9]. Ver figura 1

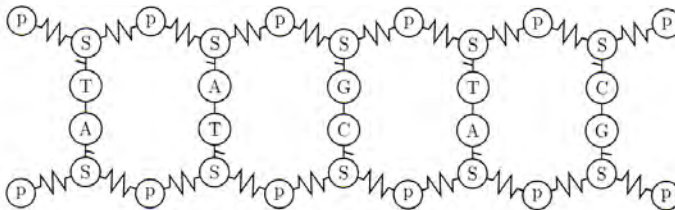


Figura 1. Modelo del ADN. Las masas están representadas por P=fosfato, S=azúcar, A=adenina, C=citosina, G=guanina, T=timina

La cadena que se propone para este trabajo es la presentada en la figura 2, donde la masa p se compone de las dos masas de los fosfatos. La masa m_1 esta compuesta por adenina, timina y dos azúcares, y, la masa m_2 está compuesta por guanina, citosina y dos azúcares. Las constantes de fuerza que unen las masas m_1 y m_2 a la masa p son distintas, ya que la union entre las bases es en un caso por tres puentes de hidrógeno y en el otro por dos, además las uniones de estas masas a los azúcares es diferente, esto hace que las fuerzas paralelas a la cadena sean diferentes. Los valores de las masas en unidades atómicas (u. m. a.) son mostrados en la tabla 1.



Figura 2. Celda unidad.

Tabla 1. Número de átomos de oxígeno, O, nitrógeno, N, carbono, C, fósforo, P, e hidrógeno, H, que componen las bases, el azúcar y el fosfato hallados en la cadena de ADN y masa total de cada uno de estos.

	O	N	C	P	H	Masa total (u. m. a.)
Adenina	0	5	5	0	4	134,1226
Citosina	1	3	4	0	4	110,0977
Guanina	1	5	5	0	4	150,1226
Timina	2	2	5	0	5	125,1104
Azúcar	1	0	5	0	7	83,1128
Fosfato	4	0	0	1	1	95,9817
masa m_1	4	7	20	0	23	425,4586
masa m_2	4	8	19	0	22	426,4459

3. Matriz dinámica

Para el desarrollo de las propiedades vibracionales tomaremos como punto de partida la aproximación de Born–Oppenheimer, la cual supone que los iones se mueven mucho más lento que los electrones de valencia. Tomando así ecuaciones independientes para los iones y para los electrones. En las ecuaciones

de movimiento para los iones, que en nuestro caso son las importantes, podemos suponer una solución armónica cuando consideramos una cadena infinita y ordenada de la forma:

$$u_{ibn} = (m_b)^{-1/2} u_{bn}(\mathbf{q}) e^{-i\omega\mathbf{q} + i\mathbf{q}\mathbf{R}_i}, \quad (1)$$

donde u es el desplazamiento del átomo b en la celda n en la dirección i . La parte exponencial refleja la periodicidad de la red. Al reemplazar esta solución en las ecuaciones de movimiento llegamos a

$$D_{ii'}(b, b', \mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{M_b \cdot M_{b'}}} \sum_{n'} \Phi_{ii'}(nb, n'b') \cdot u_{i'}(b') e^{-i\mathbf{q} \cdot [\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}]}, \quad (2)$$

donde la matriz D es definida como la transformada de Fourier de las constantes de fuerza. Teniendo así una ecuación secular. La matriz Φ está formada por las constantes de fuerza $\Phi_{ii'}(nb, n'b')$. Para estas constantes tomamos el modelo de ion rígido, el cual supone las masas como esferas totalmente rígidas. Con estas aproximaciones realizadas tenemos el sistema como una unión de osciladores armónicos, con interacción a primeros vecinos únicamente.

Con el fin de analizar cadenas desordenadas es conveniente el uso de la densidad de estados (DOS -por sus siglas en inglés-). Una forma de calcular la DOS es mediante las funciones de Green, $G(r)$, [10], las cuales están definidas como

$$G(r) = [z\hat{I} - \hat{H}]^{-1}, \quad (3)$$

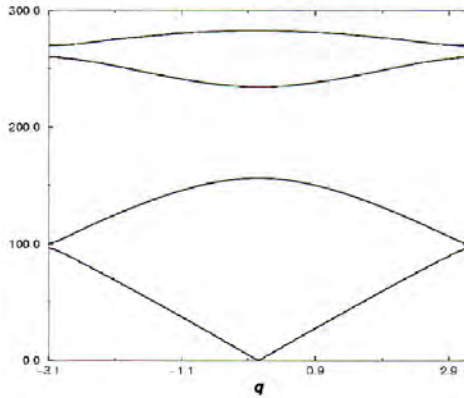
donde \hat{H} es el hamiltoniano del sistema, \hat{I} es la matriz unidad, z es una variable compleja donde la parte real designa la energía del sistema y la parte imaginaria es un término infinitesimal para evitar la discontinuidad que se obtiene en el plano complejo. Para hallar la DOS se utiliza la parte imaginaria de la traza de la función de Green, esto es,

$$D_n(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} (\text{Tr } G_n(r)) \quad (4)$$

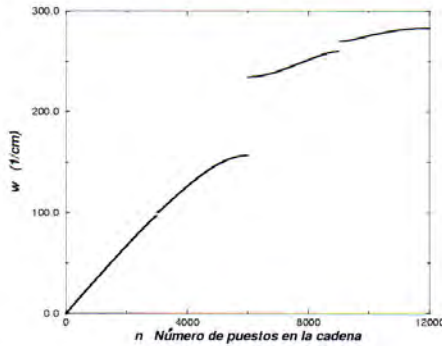
4. Resultados

En primer lugar se realizará el estudio de la cadena ordenada formada por las bases ($m1$ y $m2$) y el azúcar (p), figura 2. En las gráficas 3 se presentan las relaciones de dispersión de las cadenas infinita y finita para 12000 sitios.

En las dos situaciones se observa la formación de cuatro ramas correspondiendo a tres ópticas y una rama acústica. Sin embargo se podría pensar que la primera rama óptica correspondería a un doblamiento de la rama acústica. Esta



(a) Relación de dispersión de la cadena infinita y ordenada



(b) Relación de dispersión de la cadena finita y ordenada

Figura 3. Relación de dispersión de la cadena infinita y ordenada

interpretación toma mas fuerza al comparar las masas de las bases las cuales son muy parecidas, su diferencia es menor al 1 %.

Una característica importante a analizar son los modos normales de oscilación. En la gráfica 3(a) se tienen siete puntos, entre el rango $q = 0$ y $q = \pi$, en los cuales la velocidad de grupo es cero. Un caso especial es el punto $q = 0$

en la rama acústica. Allí no es posible definir una velocidad de grupo, ya que se tiene una singularidad matemática y no una singularidad de Van-Hove.

La otra situación en la cual se encuentra la velocidad de grupo igual a cero es cuando $q = \pi$. Para las dos frecuencias, ω_1 y ω_3 se tiene que la masa m_1 esta en el punto de equilibrio, mientras que las otras masas oscilan alrededor de su punto de equilibrio. Para las otras dos frecuencias, ω_2 y ω_4 , se tiene que la masa fija es m_2 . Ver figura 4(a). Para todas las demás frecuencias los modos normales de oscilación son muy complicados y tienen frecuencias que conectan estos ocho modos normales. En este modelo al hacer las masas m_1 y m_2 y las constantes de fuerza k y g iguales se tendrán dos puntos de degeneramiento en $q = \pi$

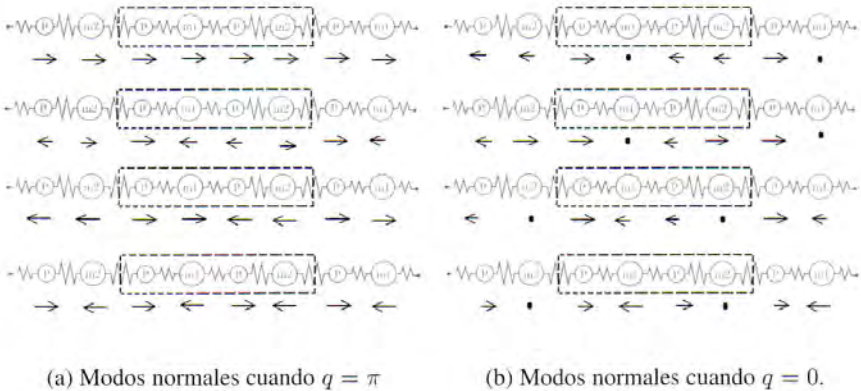


Figura 4. Modos normales.

La densidad de estados calculada por medio de funciones de Green se presenta en la figura 5. Esta densidad de estados esta reproduciendo las brechas tanto acústicas como ópticas obtenidas en la relación de dispersion, vemos que la brecha entre la rama acústica y la primer rama óptica es muy pequeña, esto debido a la semejanza entre el valor de las masas, como ya se había mencionado.

Teniendo en cuenta que las moléculas de ADN, no tiene un orden específico para las bases, estudiamos el comportamiento de la densidad de estados para la cadena desordenada. Una de las características mas importantes de la cadena real de ADN es que los fosfatos, masas p , siempre ocupan un sitio entre pares de bases-azucars. De esta manera el desorden lo tendremos en las posiciones de las masas m_1 y m_2 que representan las distintas parejas bases-azucars. Este desorden es el que da la diferencia del código genético.

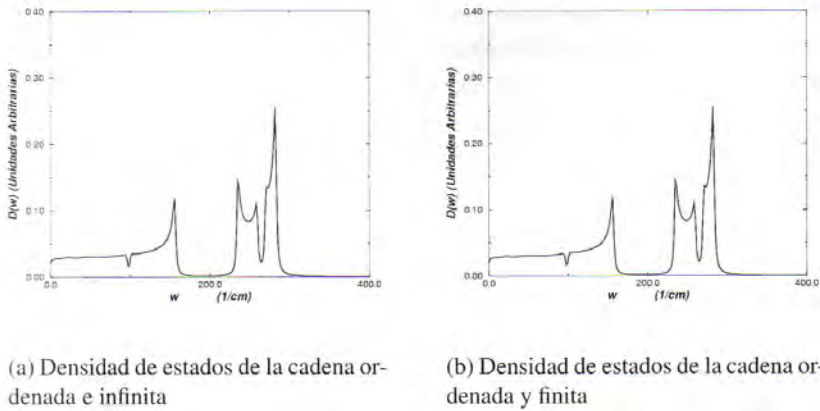


Figura 5. Densidad de estados de las cadenas ordenadas por medio de la función de Green.

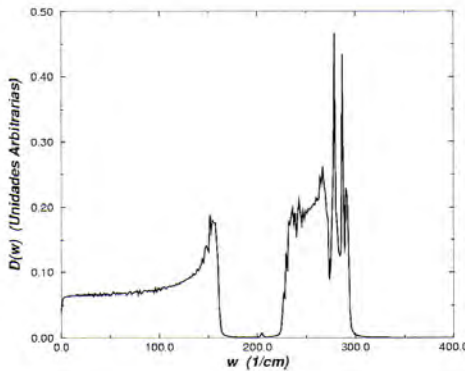


Figura 6. Densidad de estados para la cadena desordenada.

En la DOS (figura 6) de la cadena desordenada, representando un ADN mas real, se observa la supresión de las dos brechas mas pequeñas, y la presencia marcada de solo dos ramas. En este punto se hace necesario caracterizar dichas ramas, sin embargo esto necesita un estudio mas profundo del presentado aquí. Este característica es propia de sistemas diatómicos.

Un análisis mas cuidadoso de la DOS nos indica la presencia de estados en la brecha, estos estados son estados de interface originados por la finitud del sistema y dependen de las masas que se hallen en los extremos de la cadena.

5. Conclusiones

El ADN es una estructura biológica que presenta una composición química muy sencilla. Sin embargo su forma física no es tan fácil de reproducir teóricamente por su forma helicoidal. De allí que la mayoría de trabajos estén enfocados en representar la molécula como una cadena lineal.

Presentamos una cadena lineal, en la cual se mantuvo fija una masa cada dos átomos. Esta masa es la que representa los fosfatos. Las otras dos masas son las que representan los pares de bases y azúcares teniendo en cuenta las leyes de Chargaff. La unión atómica de estas masas se representa por medio de resortes de diferentes constantes.

Tomando cadenas ordenadas infinitas y finitas se hallaron las propiedades vibracionales para la cadena lineal propuesta, hallando cuatro ramas de dispersión, una acústica y tres ópticas. Entre la rama acústica y la primera rama óptica se encuentra una brecha de energía muy pequeña, esto debido a la mínima diferencia que se encuentra entre las masas de las bases. Igualmente fueron hallados los modos normales de vibración del ADN para los puntos en los cuales la velocidad de grupo es igual a cero y para el punto de frecuencia mínima $\omega(q = 0) = 0$.

La densidad de estados para estas cadenas reproducen las brechas de energía que aparecen en la relación de dispersión. La diferencia entre estas densidades de estado es mínima, esto era de esperarse ya que los estados para ambas cadenas deben ser los mismos.

Al tomar la cadena desordenada totalmente, (los pares de bases deben ser colocados aleatoriamente respetando los puestos de los fosfatos), las brechas entre la rama acústica y la primera rama óptica y entre las ramas ópticas superiores desaparecen, esto sucede, por las mínimas diferencias entre las masas de las bases. La cadena desordenada presente únicamente una rama acústica y una rama óptica teniendo comportamiento de una cadena lineal diatómica. Este comportamiento valida la representación de la cadena de ADN por medio de cadenas diatómicas para el estudio de las propiedades vibracionales [11, 12, 13].

Referencias

- [1] L. Pauling and R. P. Corey *Nature* **171** 346 (1953)
- [2] Watson and Crick *Nature* **171** 737 (1953)
- [3] A. Yu Kasumov, D. V. Klinov, P. E. Roche, S. Gueron, and H. Bouchiat *Appl. Phys. Lett.* **84** 1007 (2004)

- [4] <http://www.cnrs.fr/Cnrspresse/n391/html/en391a02.htm> marzo (2001)
- [5] D. Porath, A. Bezryadin, S. de Vries, and C. Dekker *Nature* **403** 635 (2000)
- [6] A. J. Storm, J. van Noort, S. de Vries, and C. Dekker. *Appl. Phys. Lett.* **79** 23 (2001)
- [7] H-W Fink and C. Schönenberger *Nature* **398** 407 (1999)
- [8] Xin-Qi Li and Yi jing Yang *Preprint* arXiv/cond-mat/0107015 (2001)
- [9] Michel Peyrard and Jean Farago *Physica A* **288** (2000)
- [10] E. N Economou *Greens Functions in Quantum Physics*, Springer-Verlag, (1983)
- [11] J. W. Powell, G. S. Edwards, L. Genzel, F. Kremer, and A. Wittlin *Phys. Rev. A* **35** 3929 (1987)
- [12] L. L. Van Zandt and V. K. Saxena. *Phys. Rev. A* **35** 5 (1989)
- [13] M. B. Hakim, S. M. Lindsay, and J. Powell *Biopolymers*. **23** (1984)