

Расчет коэффициента интерференции многоатомной молекулярной структуры ДНК

Анастасия Харламова
Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова
Архангельск, Россия
Kharlamova.anastasya2015@yandex.ru

Аннотация— В данной работе рассматривается молекула ДНК как объект для исследования, структура которого дает информацию, используемую в разных областях знания: медицина, биология, биофизика. В статье показана упрощенная модель молекулы, расчет коэффициента интерференции.

Ключевые слова— лазерные импульсы, молекула, ДНК, спектр излучения.

I. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время большое внимание приковано к изучению сложных молекулярных структур с использованием ультракоротких лазерных импульсов [1,2]. Это связано со сложностями анализа молекулярных нестационарных структур другими способами [3,4]. Методы из области химии, метод Слэнгера например, дают результаты точные, но исследование ведется долго и трудозатратно. Рентгеновское облучение не дает точных результатов. Именно поэтому сейчас использование ультракоротких лазерных импульсов заинтересовало ученых [5,6]. С их помощью в перспективе возможно не только определение структуры многоатомных объектов, но и исследование молекулярных процессов в ней [7,8], т.к. ультракороткие импульсы работают в очень малом временном диапазоне, соответствующим атто и фемтосекундному масштабу.

Проблема использования ультракоротких лазеров сегодня заключается в первую очередь в недостатке теоретического аппарата для интерпретации получаемых экспериментально результатов. Расшифровка спектров взаимодействия усложняется без теоретических расчетов процесса облучения молекулы лазерными импульсами. Существуют способы расчёта взаимодействия импульсов с одной мишенью, одним атомом или молекулой состоящей из атомов одного вещества. Но есть молекулярные объекты, интересные для исследования и состоящие из множества атомов. Расчет в данном случае усложняется количеством атомов, разной электронной плотностью, переизлучением и т.д. Такой объект можно рассчитать на качественном уровне, используя методы моделирования, задавая координаты атомов, входящих в систему [9,10]. Но для расчета системы, задаваемой многомерным объемом координат необходимо большое количество времени (более суток). Для упрощения необходимо отойти от использования координат и ввести аналитическую формулу спектра взаимодействия ультракоротких импульсов с объектом. Основная составляющая формулы спектра – интерференционный фактор. Он меняется в зависимости от пространственного положения элементов в системе. Описать аналитически его для молекулы реальной, состоящей из множества атомов невозможно. В данной работе предлагается упрощенная модель молекулы ДНК,

с помощью которой в расширенной версии статьи рассчитывается интерференционный фактор.

II. ОСНОВНАЯ ИДЕЯ РАБОТЫ

В данной работе в качестве объекта исследования используем спираль молекулы ДНК, это облегчит процесс рассмотрения атомной модели молекулы. Используем спираль ДНК, в которой расположенные с чередованием азотистые основания цитозин и гуанин как на Рис. 1.

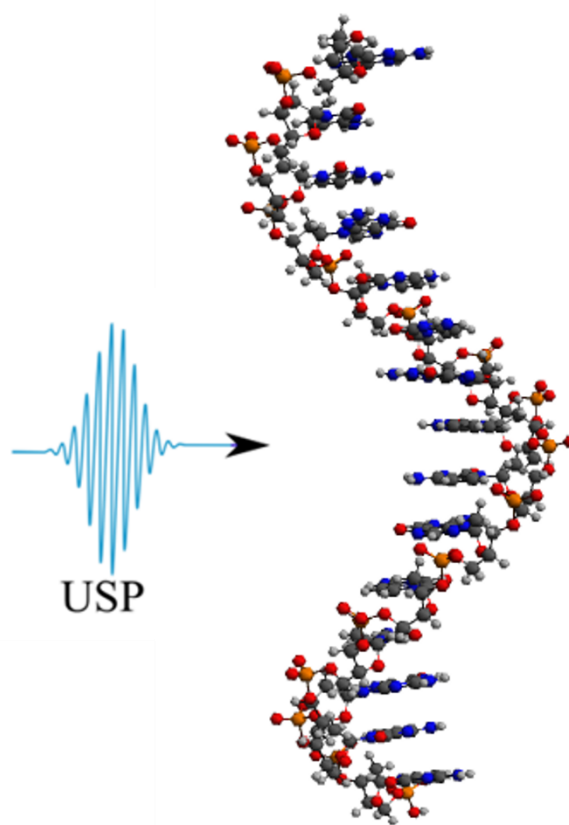


Рис. 1. Спираль молекулы ДНК, облучаемая ультракоротким лазерным импульсом (USP). Выполнено в программе Avogadro

Согласно принципу комплементарности, только они могут взаимодействовать между собой, таким образом нахождение рядом аденина и тимина исключено. Предположим, что на молекулу падает ультракороткий лазерный импульс как показано на Рис 2. В этом случае на пути излучения находится множество атомов, обладающих некоторой симметрией и периодичностью. Периодичность строения молекулы позволяет упростить модель и перейти от многоатомной структуры к системе, состоящей из более простых элементов.

Каждое азотистое основание молекулы соединяется с противоположным тремя водородными связями. Спираль ДНК состоит из остатка фосфорной кислоты и моносахарида. Таким образом эти элементы выполняют важную функцию, они «формируют» молекулу. Остальные атомы из анализа можно опустить. Таким образом внешняя часть ДНК превращается в периодичный набор элементов Рис. 2: 1 – моносахарид+остаток фосфорной кислоты, 2 – внутренняя часть: атомы азотистого основания участвующие в водородной связи.

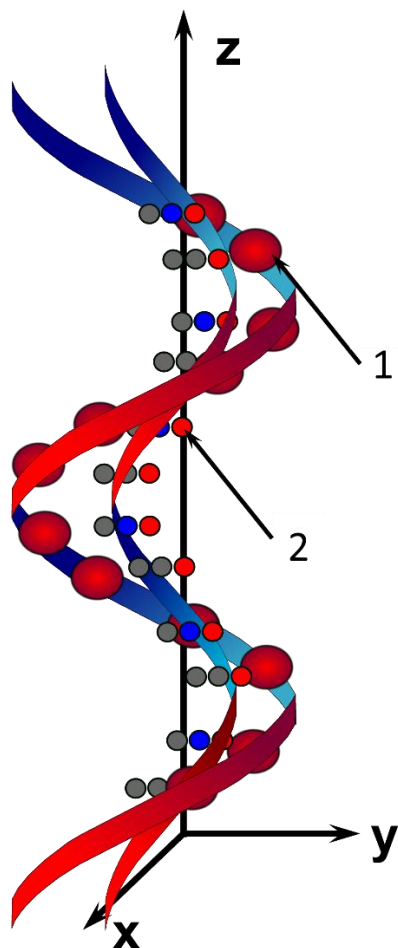


Рис 2.. Упрощенная модель одного витка спирали ДНК. Атомы, участвующие в водородной связи: серый – водород, красный – кислород, синий – азот

Для расчета спектра ранее использовался интерференционный фактор, полученный работе [9,10] (1).

$$g_N(\mathbf{p}) = \left| \sum_a e^{i \cdot \mathbf{p} \mathbf{R}_a} \right|^2. \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{p}$ – ультракороткий лазерный импульс, падающий на молекулярную систему, $\mathbf{a}$ – атомы системы, $\mathbf{R}_a$ – радиус-вектор атома.

Формулу (1) в расширенной версии статьи дорабатываем, атом заменяем на элемент и рассматриваем элементы двух сортов 1 и 2. Остальные атомы, входящие в состав молекулы не рассматриваются, считаем, что в отсутствии элементов 1 и 2 отсутствуют и остальные элементы, т.к. функция «соединения» не выполняется. Расчет нового интерференционного фактора подробно показан в расширенной версии статьи.

III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В тезисах описана идея нового упрощенного расчета интерференционного фактора для случая многоатомной молекулярной структуры при облучении ее ультракороткими лазерными импульсами. Показан объект исследования – реальная молекула ДНК и падающий на нее импульс. Построена упрощенная модель исследуемой системы, на основе которой в расширенной версии статьи будет проводиться вывод формулы интерференционного фактора. Далее данный вывод будет использован для моделирования спектров рассеяния.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено при поддержке Гранта Президента Российской Федерации No. MD-4260.2021.1.2; государственного задания Российской Федерации No. 0793-2020-0005 и No. FSRU-2021-0008

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Young, L. Roadmap of ultrafast x-ray atomic and molecular physics / L. Young et al. - J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2018.
- [2] Sanger, F. DNA sequencing with chain-terminating inhibitors / F. Sanger, S. Nicklen, A. R. Coulson. – 1977. – P. 5463-5467.
- [3] Chen, Y.-S. DNA sequencing using electrical conductance measurements of a DNA polymerase / Y.-S. Chen et al. // Nat. Nanotechnology – 2013. – P. 452-458.
- [4] Ying, Y. L. Nanopore-based technologies beyond DNA sequencing / Y. L. Ying, ZL. Hu, S. Zhang et al. // Nat. Nanotechnol. – 2022. – P. 1114–1136.
- [5] Shi, Y. A. glimpse of structural biology through X-ray crystallography / Y A. Shi // Cell. – 2014. – P. 995-1014.
- [6] Kraus, P. M. The ultrafast X-ray spectroscopic revolution in chemical dynamics / P. M. Kraus et al. // Nature Reviews Chemistry. – 2018. – P. 82–94.
- [7] Kahra, S. A molecular conveyor belt by controlled delivery of single molecules into ultrashort laser pulses / S. Kahra, G. Leschhorn, M. Kowalewski et al. // Nature Phys. – 2012. – P. 238–242.
- [8] Nebbioso, A. Time-resolved analysis of DNA-protein interactions in living cells by UV laser pulses / A. Nebbioso, R. Benedetti, M. Conte et al. // Sci Rep. – 2017. – P. 11725.
- [9] Makarov, D.N. Specificity of scattering of ultrashort laser pulses by molecules with polyatomic structure / D.N. Makarov, K.A. Makarova, A.A. Kharlamova // Scientific Reports. – 2022. – P. 4976.
- [10] Makarov, D.N. Modeling of Scattering Spectra of DNA Molecules / D.N. Makarov, A.A. Kharlamova // XV International Scientific-Technical Conference on Actual Problems Of Electronic Instrument Engineering (APEIE). – 2021