

INVESTIGACIÓN

El ADN como un conjunto de osciladores armónicos acoplados

S. C. Gómez-Carrillo¹ y R. R. Rey-González²

¹Grupo de Física de Superficies, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina

²Grupo de Óptica e Información Cuántica, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Recibido: 1 de Febrero de 2007; Revisado: 15 de Junio de 2007; Aceptado: 20 de Julio de 2007

Resumen Se modela el ADN como una cadena lineal de osciladores armónicos acoplados, encontrando el espectro vibracional para cadenas ordenadas y desordenadas. En particular se calcula la relación de dispersión para sistemas ordenados y la densidad de estados para ambas situaciones. En el caso desordenado se encuentran resultados sugiriendo un comportamiento tipo molécula biatómica.

Palabras Clave: ADN, espectro fonónico, densidad de estados, relación de dispersión.

Abstract— The DNA is modelling as a linear chain of coupled harmonic oscillators. The vibrational spectra are presented for ordered and disordered chains. Particularly, dispersion relation is calculated for ordered case and the density of states is showed for both situations. The results permit supposes that disordered chains have diatomic behaviour.

Keywords: DNA, phononic spectra, density of state, dispersion relation.

I. INTRODUCCIÓN

Desde hace algunas décadas la física se ha comenzado a interesar por sistemas que son llamados de baja dimensionalidad [1]. Hoy en día estos sistemas también son conocidos como sistemas nanoscópicos o nanométricos, que se refieren al tamaño de la muestra en estudio (10^{-9} m). Entre estos sistemas encontramos los puntos cuánticos y los nanotubos, entre otros. Indudablemente muchos sistemas biológicos están dentro de estas unidades, tales como el ácido desoxirribonucleico (ADN) y el ácido ribonucleico (ARN). Estos dos sistemas son relativamente fáciles de simular, ya que estructuralmente son sencillos, sin embargo la forma geométrica y espacial que toman no es tan sencilla. El ADN ha sido estudiado desde la física por sus propiedades electrónicas, sin embargo todavía existen contradicciones acerca de su comportamiento electrónico [2-5].

El ARN y el ADN son polímeros lineales que forman cadenas largas. Los ejes principales de las cadenas lo forman azúcares y fosfatos. Cada uno de estos polímeros está constituido por cuatro bases nitrogenadas. En común tienen la Adenina (A), Guanina (G), y Citosina (C). El ARN tiene como cuarta base el Uracilo (U), mientras que el ADN tiene como base la Timina (T). Cada uno de estos sistemas tiene funciones biológicas diferentes dentro de la célula y a causa de las bases

nitrogenadas las estructuras químicas son diferentes.

El ADN es una cadena doble lineal que esta enrollada helicoidalmente alrededor de un eje. Sus dimensiones son de 10 anstrongs de radio, y de largo puede tener metros (Figura 1), es por esto que es considerada una macromolécula. Las dimensiones del ARN son muy parecidas, pero gracias a que tiene entre sus bases al Uracilo, este no se extiende en una cadena lineal como el ADN presentando en algunos casos ramificaciones.

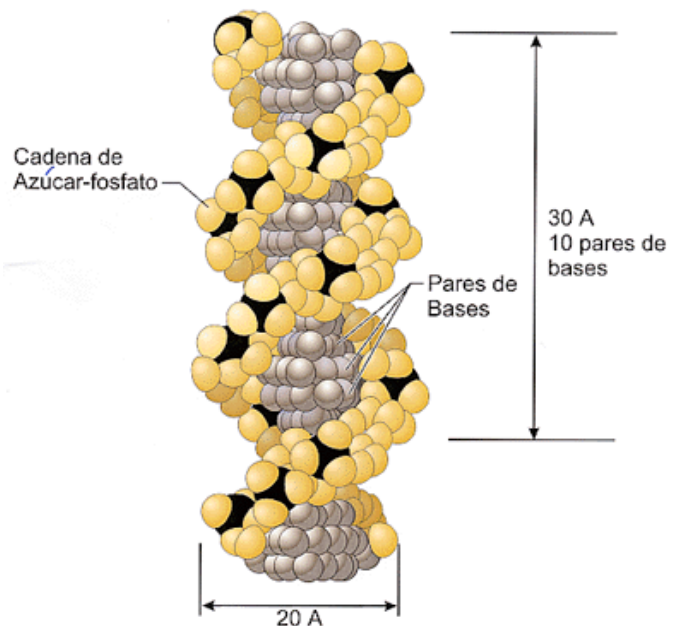


Fig.1: Dimensiones del ADN. Figura tomada de <http://superfund.pharmacy.arizona.edu/toxamb/c1-1-1-3.html>

El ARN se clasifica en estructuras primarias, secundarias y terciarias. Todas estas dependen de la forma espacial y geométrica que formen las bases. La estructura primaria es una cadena lineal parecida a la cadena de ADN. La estructura secundaria tiene regiones dentro de la misma cadena capaces de aparearse, es decir, tiene algunos enlaces sueltos. La estructura terciaria, es un plegamiento difícil de la estructura secundaria [4]. Debido a estas ramificaciones modelar el ARN, en particular las estructuras secundarias y terciarias no es una tarea fácil. En el presente trabajo presentamos un modelo lineal mediante el cual se puede representar fundamentalmente el ADN o la estructura primaria del ARN

I. MODELO FISICO

Los enlaces entre las diferentes bases nitrogenadas son por puentes de hidrógeno, y de acuerdo a las reglas de Chargaff estas aparecen siempre en parejas a saber: A=T y G=C. En el primer caso se presenta un doble enlace y en el segundo existe un enlace triple (figura 2).

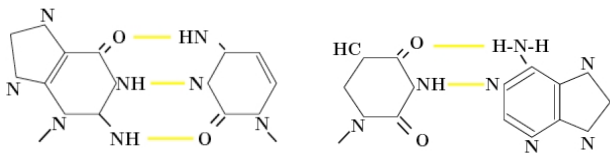


Fig. 2: Enlaces por puente hidrogeno entre las cuatro bases que forman el ADN.

La estructura helicoidal de escalera la forma la manera como se encuentran situados los azúcares y los fosfatos. Sin embargo en una primera aproximación podemos despreciar los efectos de esta torsión. Igualmente podemos representar tanto los azucars, los fosfatos, así como cada una de las bases mediante una unidad, tal como se indica en la figura 3. Cada una de estas unidades tiene la masa que le corresponde [6]. Las anteriores aproximaciones permiten modelar el ADN como una doble cadena lineal acoplada lateralmente. Equivalentemente la estructura primaria del ARN se puede representar mediante este modelo sustituyendo la unidad G por la respectiva unidad U. El principal efecto es el cambio del valor de la respectiva masa.

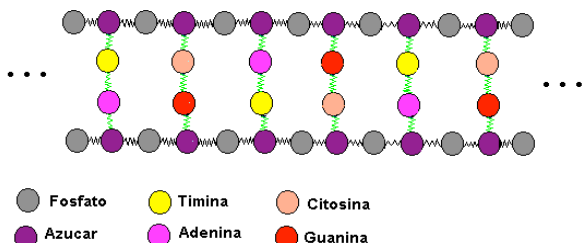


Figura 3: Modelo de escalera de la cadena de ADN, en forma infinita.

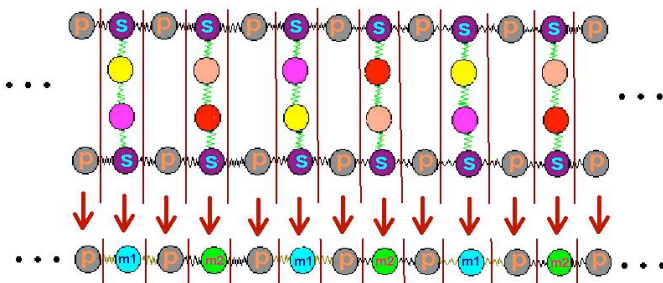


Figura 4: Modelo lineal de la cadena de ADN.

No obstante el anterior modelo ser aparentemente simple, en un estudio de las vibraciones este sistema incluiría modos debidos al acoplamiento lateral de las dos cadenas. Con el objetivo de hacer un análisis libre de estos efectos procedemos

a representar el ADN como una sola cadena lineal en la forma indicada en la figura 4. En este caso la cadena está formada por tres masas y dos constantes de fuerza. En la tabla 1 se presenta el número de átomos de oxígeno (O), nitrógeno (N), carbono (C), fósforo (P) e hidrógeno (H) que representa cada una de estas masas.

Unidad	O	N	C	P	H	Masa (u.m.a.)
m1	4	7	20	0	23	425.45
m2	4	8	19	0	22	425.44
p	8	0	0	2	2	191.96

Tabla 1: Número de átomos de oxígeno (O), nitrógeno (N), carbono (C), fósforo (P) e hidrógeno (H) que representa cada una de las masas.

II. RESULTADOS

El hamiltoniano que describe el modelo de cadena lineal propuesto es:

$$H = \sum_i \frac{1}{2} M_i \dot{u}_i^2 + \sum_i \frac{1}{2} K_i (u_{i+1} - u_i)^2, \quad (1)$$

donde m_i y u_i representan la masa y el desplazamiento de la i -ésima masa, respectivamente, y K_i es la constante de acoplamiento entre las masas i e $i+1$. Los valores para las constantes de acoplamiento son tomados de la referencia [7].

En la figura 5 se muestra la relación de dispersión obtenida al suponer el ADN como un sistema lineal ordenado. En este caso existe una celda unitaria con una constante de red a_0 , cuatro masas: dos masas tipo p , una tipo m_1 y otra del tipo m_2 .

Se puede observar una sola rama acústica y tres ramas ópticas, presentando una brecha de vibraciones prohibidas de importancia entre la segunda y tercera ramas ópticas. La brecha entre la banda acústica y la primera rama óptica es comparativamente pequeña, probablemente debido a la mínima diferencia que existe entre las masas m_1 y m_2 que es solamente del 1%.

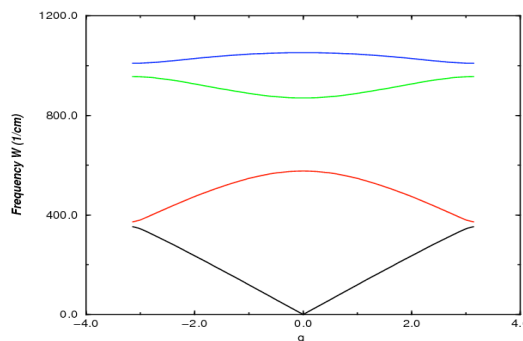


Fig. 5: Relación de dispersión de la cadena de ADN ordenada.

La densidad de estados (DOS) que se puede observar en la figura 6 coincide perfectamente con los resultados anteriores, en particular se pueden observar la diferencia entre las brechas de vibraciones prohibidas. Resultados no mostrados aquí permiten asociar la rama óptica superior con cadenas formadas

exclusivamente por las bases A-T, así como la rama óptica inmediatamente inferior con cadenas C-G únicamente [8]. Resultados que refuerzan la hipótesis que la rama óptica inferior se puede interpretar como un plegamiento o *folding* de la rama acústica dada la semejanza de las masas m_1 y m_2 .

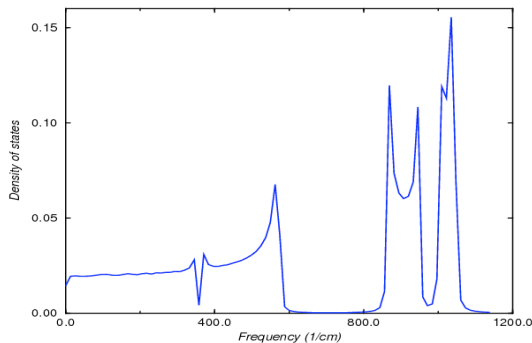


Fig 6: Densidad de estados de la cadena lineal ordenada de ADN

EL ADN se caracteriza por ser un sistema desordenado. Las parejas A-T y C-G no presentan un ordenamiento espacial. Es este aparente desorden el que parece permite codificar la información genética. El desorden se presenta entre las unidades m_1 y m_2 , teniendo siempre fijas las p . El estudio de la cadena desordenada exige analizar cadenas finitas. Este hecho limita el tamaño de los sistemas bajo estudio, dado que es necesario diagonalizar exactamente matrices de orden $2n \times 2n$, donde n es el número total de masas m_1 y m_2 de la cadena bajo estudio.

En la figura 7 se encuentra la DOS para la cadena desordenada, observándose un comportamiento de cadena diatómica, presenta una rama acústica y una rama óptica.

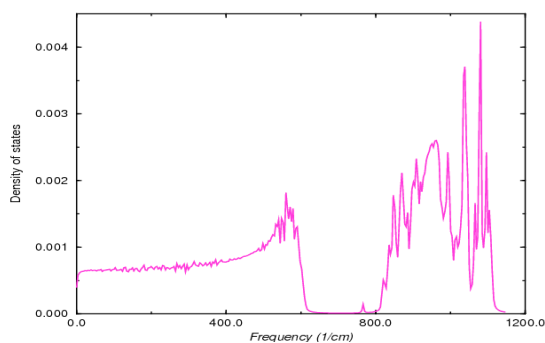


Fig. 7: Densidad de estados para cadenas desordenadas

III. CONCLUSIONES

Se presenta dos formas de modelar macromoléculas casi unidimensionales, tales como el ADN o el ARN. No obstante la simplicidad de tales modelos, estos permiten el entendimiento de algunas de las propiedades vibracionales de este tipo de sistemas. Las cadenas de ADN desordenadas presentan un comportamiento de cadena diatómica independientemente de estar formadas por al menos tres masas.

Los autores desean agradecer a los profesores K. M Fonseca (Universidad Nacional, Bogotá Colombia) y P.A. Schulz (Universidade Estadual de Campinas, Brasil) las valiosas discusiones y sugerencias. Igualmente R.R.R-G desea agradecer el soporte financiero de la Fundación para la Promoción de la Investigación y la Tecnología.

REFERENCIAS

- [1] B. C. Crandall. Nanotechnology. Molecular Speculations on Global Abundance. MIT Press, Cambridge (2000).
- [2] D. Porath, A. Bezryadin, S. de Vries, and C. Dekker, Nature, 403, 635 (2000).
- [3] A. J. Storm, J. van Noort, S. de Vries, and C. Dekker, Appl. Phys. Lett. 79, 23 (2001).
- [4] Hans-Werner Fink and Christian Schönenberger, Nature, 398, 407 (1999).
- [5] R. A. Caetano and P. A. Schulz. Phys. Rev. Lett., 95, 126601 (2005).
- [6] S. C. Gómez-Carrillo, K. M. Fonseca and R. R. Rey-González. Brazilian Journal of Physics, 36, 828 (2006).
- [7] J. W. Powell, G. S. Edwards, L. Genzel, F. Kremer, and A. Wittlin, Phys. Rev. A. 35, 3929 (1987).
- [8] S. C. Gómez Carrillo. Propiedades vibracionales del ADN. Trabajo de Grado. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá 2003.

Sandra Carolina Gómez Carrillo: Física, Universidad Nacional de Colombia. Estudiante de Doctorado en la Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe Argentina, bajo la dirección del Doctor Pablo Bolcatto.

Rafael Ramón Rey González: Físico, Universidad Nacional de Colombia. Doctor en Ciencias, Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, Brasil. Profesor Asociado de la Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá.