

PACS: 07.05.Tp, 81.07.-b, 03.67.Lx

DNT-nin MODELLEŞDİRİLMƏSİ VƏ KOMPÜTER TƏDQIQI

A.Q.HƏSƏNOV

Bakı Dövlət Universiteti

hasanovarzuman@hotmail.com

NanoEngineer-1 proqramı vasitəsilə DNT-nin visual modeli qurulmuş və temperatura davamlılığı molekulyar dinamika metodu ilə tədqiq olunmuşdur. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, DNT temperatura davamlı nanomaterial kimi gələcəkdə müxtəlif elektron çiplərində geniş tətbiq oluna bilər.

Açar sözlər: Kompüter modelləşdirmə, nanotexnologiya, kvantmexaniki hesablama.

DNT çip texnologiyası keçən əsrin 90-cı illərindən yeni texnologiya kimi sürətlə inkişaf etməyə başlamışdır. Bu texnologiyanın fundamental və tətbiqi tibdə, biologiyada və hətta elektronikada oynayacağı mühüm rolunu nəzərə alaraq, bu sahədə geniş tədqiqatlara başlanılmış və hal-hazırda da bu tendensiya sürətlə davam edir. DNT çiplərinin yaradılmasının nəzəri əsasları sadə və aydındır. Bunlar ikiqat spiral strukturlu DNT molekulunun formalaşmasına əsaslanır. Komplementarlıq prinsipinə əsaslanaraq birqat polinukleotid zəncirindən alınır və DNT molekulunun strukturunu təkrar edir. DNT çipi sahəsi 1 sm^2 olan lövhədir və burada müəyyən edilmiş sıra ilə qəfəslər var və qəfəslərin hər birində birqat polinukleotid zənciri yerləşir. Bu polinukleotid zəncirlərin sayı 1 milyondan çox ola bilər və hər bir zəncirin uzunluğu 10 - 1000 nukleotid ardıcılığının uzunluğuna bərabər olur. Son zamanları mikroelektronikanın ehtiyaclarını nəzərə alaraq, DNT çiplərinin daha səmərəli sintezini həyata keçirən üsul tapılmışdır. Bu üsul ultrabənövşəyi şüalarla litoqrafiya texnologiyasına əsaslanır. Bu texnologiya vasitəsilə lövhə üzərində oliqonukleotidləri sintez etmək olur. Sonradan oliqonukleotid ardıcılığı bioloji DNT molekulu ilə hibridləşdirilərək lazım olan informasiyanı özündə saxlayır. DNT çiplərinin unikal xassələrindən istifadə edərək onların vasitəsilə qenomun oxunmasında, analiz edilməsində, mutasiyaların aşkarlanmasında

istifadə edirlər. Bundan başqa DNT çipləri mikroelektronikada informasiya daşıyıcısı kimi əvəzsiz materiallardır. Geniş tətbiq sahələrinə malik olan DNT çiplərinin, xüsusilə onun nanotərtibdə yaradılmış formalarının alınması nanotexnologiyanın ən mühüm nailiyyətlərindən biridir.

Əsas komponenti oliqonukleotid olan DNT çiplərinin bioloji DNT molekulları ilə hibridləşdirilməsi zamanı DNT-nin hansı energetik halda olması mühüm rol oynayır. Energetik vəziyyətlərindən asılı olaraq oliqonukleotidə hibridləşən DNT molekulları spesifik DNT çiplərinin alınmasına şərait yaradır. Odur ki, model təcrübələrdə DNT molekulunun energetik səviyyələrinin müəyyən edilməsi, yəni onun temperaturdan asılı olaraq öyrənilməsi mühüm əhəmiyyət kəsb edir.

İstifadə olunan metod və proqram

Molekulyar dinamika metodunun əsasında çoxatomlu molekulyar sistem anlayışı durur. Belə sistemlərdə bütün atomlar qarşılıqlı təsirə malik olan maddi nöqtlərdir. Atomların hərəkəti isə klassik mexanikanın qanunları ilə təsvir olunur. Bu metod 10^6 sayda atomlardan təşkil olunmuş molekulyar sistemləri tədqiq etməyə imkan verir. Atolar səviyyədə molekulyar obyektin dinamikasını öyrənməyə imkan verir. Lakin bu metod kimyəvi reaksiyalar, eləcə də kimyəvi rabitələrin yaranması və parçalanmasını qiymətləndirməyə imkan vermir. Belə məqsədlər üçün klassik və kvant mexanikasının kombinə olunmuş yanaşmaları mövcuddur. Hər bir atomun hərəkəti klassik tənliklə ifadə olunur. Bu metodun üstünlüyü ondan ibarətdir ki, atomların hərəkət sürətlərini və sistemin temperaturunu nəzərə almaqla sistemi modelləşdirmək olur. Sistemə daxil olan hissəciklər yerləşdikləri potensial sahələri vasitəsilə bir-biri ilə qarşılıqlı təsirdə olur. Sistemin potensial enerjisi rabitə uzunluğu və rabitə bucağı, torsion bucaqlar və kovalent olmayan qarşılıqlı təsirlərdən asılı olur. Hissəciklərə təsir edən qüvvələr onların koordinatlarından asılı funksiya hesab olunur və qarşılıqlı təsir potensiallarını bilməklə molekulyar sistem modelləşdirilir.

Hazırda bu metod çoxlu sayda atomlardan təşkil olunmuş nanoklasterlər və bioloji quruluşların öyrənilməsində daha geniş istifadə olunur. $U(\vec{r})$ potensialının təsiri altında hərəkət edən n sayda atomlardan ibarət olan sistemə baxaq. Hissəciklərin hərəkətini onların koordinatları \vec{r}_i və impulsarı $\vec{p}_i = m_i \vec{v}_i$ vasitəsilə təsvir etmək olar. Məlumdur ki, belə sistemin Hamilton funksiyası

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2 \cdot m_i} + U(\vec{r}) \quad (1)$$

düsturu ilə təyin olunur. i -ci nanohissəciyə təsir edən qüvvəni

$$\vec{F}_i = - \frac{\partial U(\vec{r}_i)}{\partial \vec{r}_i} \quad (2)$$

düsturu ilə hesablamaq olar. Belə sistemin hərəkət tənliyini aşağıdakı kimi yazmaq olar:

$$\frac{\partial \vec{r}_i}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{\vec{p}}{m_i}, \quad \frac{\partial \vec{p}_i}{\partial t} = - \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} = - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}_i} = F_i(\vec{r}_i) \quad (3)$$

$$\frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} = \frac{1}{m_i} \cdot \frac{\partial \vec{p}_i}{\partial t} = \frac{1}{m_i} \cdot F_i(\vec{r}_i) \quad (4)$$

(3) və (4) tənliklərindən sistemin hərəkət tənliyi

$$m_i \cdot \frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} = F_i(\vec{r}_i) \quad (5)$$

Nyutonun ikinci qanunu alınır. Burada n - sistemdəki atomların sayı, i -atomun sıra nömrəsi, m_i – i -ci atomun kütləsi, \vec{r}_i – koordinat başlanğıcını i -ci atomla birləşdirən radius vektor, F_i – i -ci atoma təsir edən əvəzləyici qüvvə, U - sistemin potensial enerjisidir. Sistemin vəziyyətini izləmək üçün (5) tənliyini inteqrallamaq zəruridir. Yəni hissəciyin koordinat və sürətinin başlanğıc qiymətlərinə görə zamanın növbəti istənilən anında onun trayektoriyasını almaq olar. (5) hərəkət tənliyini müxtəlif metodlarla inteqrallamaq olar. Əksər metodlar sonlu fərqlər metoduna əsaslanır. Burada zaman müəyyən addımla diskret dəyişir. Ən mükəmməl metodlardan biri Verle alqoritmidir. Metodun əsas ideyası hissəciyin $\vec{r}(t + \Delta t)$ və $\vec{r}(t - \Delta t)$ vəziyyətlərini sıraya ayırmaq və sonra cəmləmək lazımdır. Nəticədə hissəciyin koordinatları üçün aşağıdakı düsturu almış olarıq:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4) \quad (6)$$

burada $\vec{a}(t)$ hissəciyin təcildir və $\vec{a}(t) = - \frac{\text{grad}U(\vec{r}(t))}{m}$ hesablanır. (6) tənliyi

əsas Verle alqoritmı adlanır. Bu alqoritm istifadə üçün kifayət qədər sadə olub və stabildir. Çatışmayan cəhəti koordinatlar üçün bir neçə başlanğıc qiymətlərinin olmamasıdır. Buna görə əsas Verle alqoritmindən əlavə bu alqoritmın sürətli variantı hazırlanmışdır. Bu zaman hissəciyin $t + \Delta t$ anındakı vəziyyəti, sürəti və təcili aşağıdakı kimi hesablanır:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2$$

$$\vec{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2} \vec{a}(t) \Delta t$$

$$\vec{a}(t) = -\frac{\text{grad}U\left(\vec{r}(t)\right)}{m} \quad (7)$$

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{1}{2} \vec{a}(t + \Delta t) \Delta t.$$

Nəticədə ixtiyari anda sistemin vəziyyəti haqqında məlumat əldə etmək, digər fiziki və kimyəvi kəmiyyətlərin qiymətlərini hesablamaq olar. Son dövrdə hazırlanmış NanoEngineer-1 proqramında molekulyar dinamika metodu əsas metod kimi reallaşdırılmışdır. Müasir dövrdə NanoEngineer-1 müxtəlif nanoquruluşlu obyektlərin öyrənilməsində geniş tətbiq olunur. NanoEngineer-1 proqramından istifadə etməklə DNT-nin kompüterdə tədqiqinə baxaq. Proqramın ümumi görünüşü və DNT-nin qurulmuş vizual modeli şəkil 1-də verilmişdir. Proqramın pəncərəsinə başlıq və menyü sətirləri, üç alətlər sətiri, iki hissədən ibarət olan işçi sahə, hesabat sahəsi və sağ hissəsində şaqüli hissəsindəki alətlər zolağı daxildir. Yeni nanoobyekti tədqiq etmək üçün əvvəlcə onun modelini qurmaq lazımdır. Bunun üçün



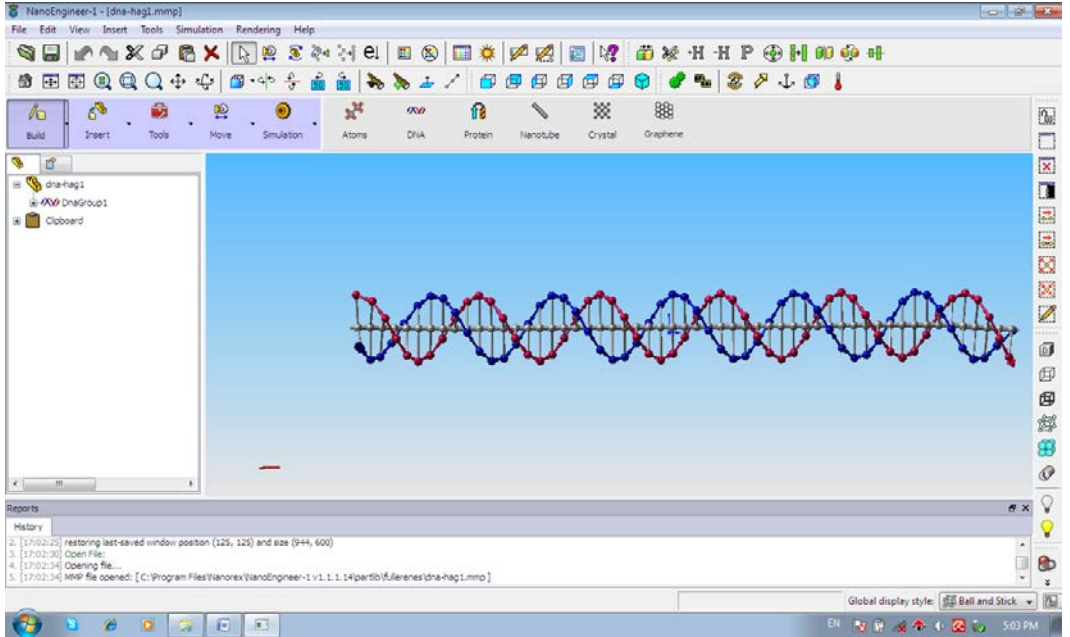
alətlərdən istifadə olunur. DNT-nin vizual modelini qurmaq üçün



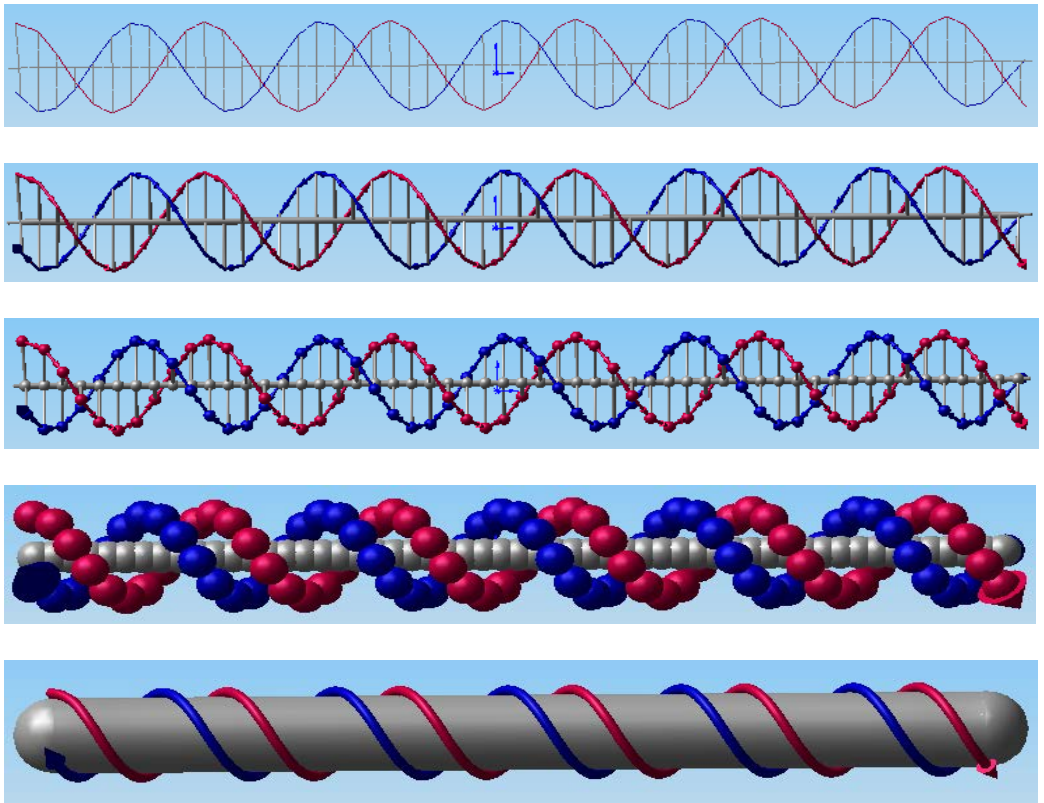
və  alətlərdən istifadə olunmuşdur (şəkil 1-2).

DNT-nin kompüterdə hesablanması

171 atomdan ibarət DNT-nin qurulmuş vizual modeli əsasında temperatura davamlılığı tədqiq olunmuşdur. Zamanın $t=1, \dots, 2$ ps ($1\text{ps}=10^{-12}$ san.) qiymətlərində DNT-nin tam enerjisinin temperaturun -80°C və $+120^\circ\text{C}$ intervalında hesablanmış qiymətləri cədvəl 1-də verilmişdir və DNT-nin tam enerjisinin temperaturdan asılılıq qrafiki qurulmuşdur. Nəticələr şəkil 5-də verilmişdir. Şəkil 3 və 4-də isə temperaturun sərhəd qiymətlərində DNT-nin forması və həmin temperaturalarda tam enerjisinin zamandan asılılığı verilmişdir.



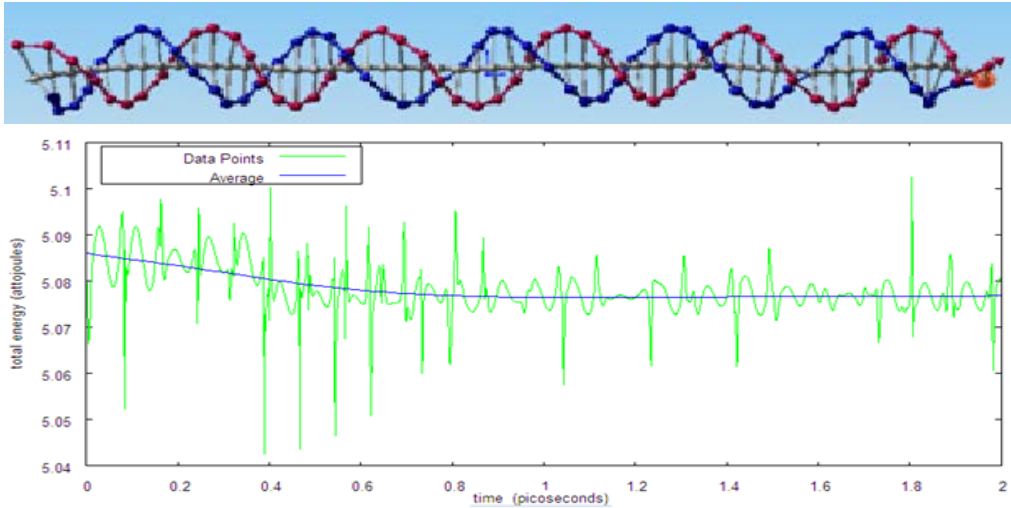
Şək. 1. NanoEngineer-1 programın əsas pəncərəsi

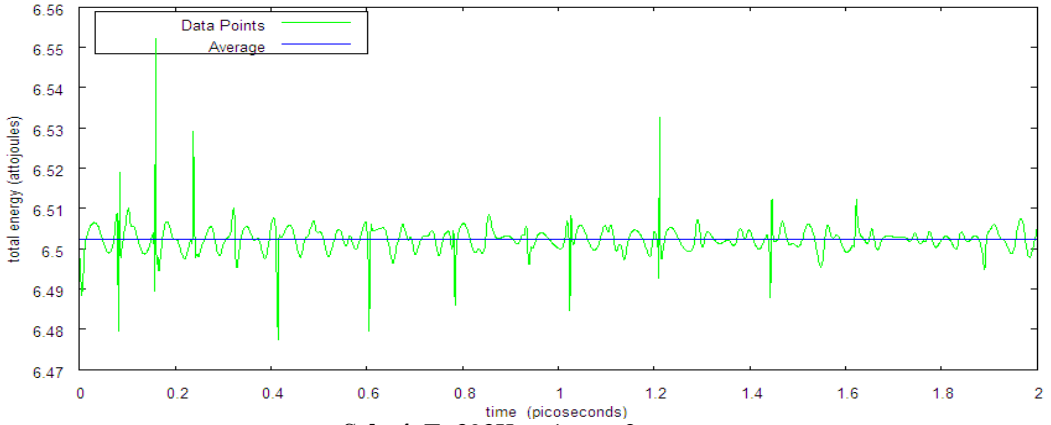
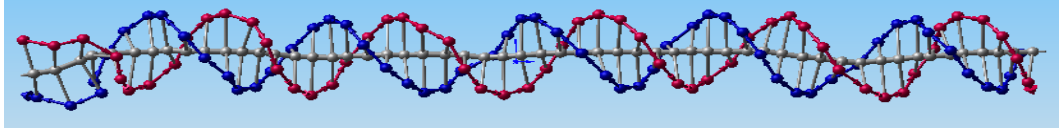


Şək. 2. DNT-nin vizual modelləri

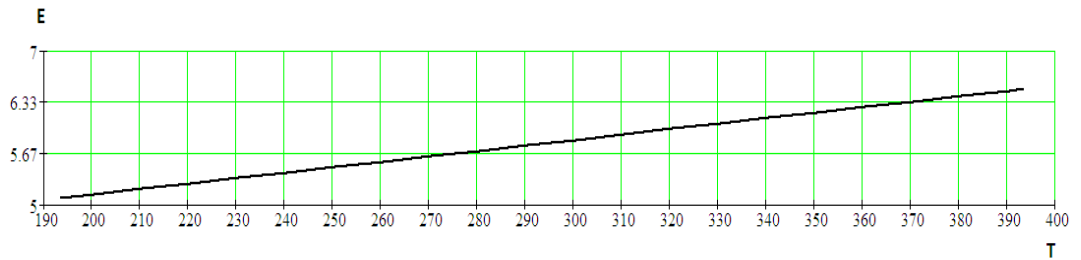
DNT -nin tam enerjisinin temperaturdan asılı hesablanmış qiymətləri

Sıra N- si	T (temperaturun C və K ilə verilmiş qiymətləri)		E (attacoul) $1 \text{ attacoul} = 10^{-18} \text{ coul}$
	1	-80	193,4
2	-73	200,4	5,13524
3	-63	210,4	5,20618
4	-53	220,4	5,27706
5	-43	230,4	5,34797
6	-33	240,4	5,41863
7	-23	250,4	5,48943
8	-13	260,4	5,56026
9	-3	270,4	5,63103
10	7	280,4	5,70183
11	17	290,4	5,77272
12	27	300,4	5,84327
13	37	310,4	5,91450
14	47	320,4	5,98516
15	57	330,4	6,05577
16	67	340,4	6,12652
17	77	350,4	6,19712
18	87	360,4	6,26839
19	97	370,4	6,33934
20	107	380,4	6,41007
21	117	390,4	6,48069
22	120	393,4	6,50224

Şək. 3. $T=193\text{K}$, $t=1, \dots, 2 \text{ ps}$



Şək. 4. $T=393K$, $t=1, \dots, 2$ ps



Şək. 5. DNT-nin tam enerjisinin temperaturdan asılılıq qrafiki

DNT üçün alınmış nəticələrin interpretasiyası

Temperaturun verilmiş qiymətlərində DNT-nin vizual modelə əsaslanan formasında çox cüzi dəyişiklik baş verir (şək. 3-4). Bununla yanaşı şəkil 5-dən görüldüyü kimi temperaturun artması DNT-nin tam enerjisinin çox kiçik xətti dəyişməsinə səbəb olur. Temperaturun $T=193,4K$ və $T=393,4K$ qiymətlərinə uyğun DNT-nin tam enerjiləri fərqi $E_{393,4K} - E_{193,4K}=0,64354$ attacoul bərabərdir. Tam enerjinin temperaturdan asılı olaraq belə kiçik dəyişməsi göstərir ki, DNT temperatura davamlı nanomaterialdir və gələcəkdə müxtəlif elektron çiplərdə geniş tətbiq oluna bilər.

ƏDƏBİYYAT

1. Вьюрков В.В., Орликовский А.А., Семенихин И.А., Негров Д.В., Озерин А.Ю., Свинцов Д.А. Математическое и компьютерное моделирование наносистем. Учеб. пособие. М.: ОАО «Можайский полиграфический комбинат», 2011, 152 с.
2. Власов А.И., Назаров А.В. Основы моделирования микро- и наносистем: учеб.

- пособие. М.: МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2011, 144 с.
3. Красильников П.С., Ревизников Д.Л. Математическое моделирование наносистем: Учебно-методический комплекс. Калуга, М.: Эйдос, 2011, 220 с.
 4. Трубочкина Н.К. Компьютерное моделирование наноструктур и наносистем. М.: Бином, 2011, 70 с.
 5. Венер М.В., Цирельсон В.Г. Компьютерное моделирование супрамолекулярных систем и наноструктур. М.: РХТУ, 2008, 128 с.
 6. Учебные методические пособия. Математическое моделирование структуры соединений с помощью пакета программ NupurChem 7.5. Воронеж: ВГУ, 2006, 44 с.
 7. Романова Т.А., Краснов П.О., Качин С.В., Аврамов П.В. Теория и практика компьютерного моделирования нанообъектов. Мультимедийное справочное пособие. Красноярск: ИПЦ КТГУ, 2002, 223 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДНТ

А.Г.ГАСАНОВ

РЕЗЮМЕ

Построена визуальная модель и на основе метода молекулярной динамики с помощью программы NanoEngineer-1 была исследована температурная устойчивость ДНТ. Результаты расчетов показывают, что ДНТ как наноматериал в будущем может быть широко использован в различных электронных чипах.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, нанотехнология, квантовомеханическое вычисление.

MODELING AND COMPUTER RESEARCH OF DNA

A.G.HASANOV

SUMMARY

The visual model was constructed and on the basis of the method of molecular dynamics, by means of NanoEngineer-1 program temperature stability of DNA has been investigated. The results of calculations show that DNA as a nanomaterial can be widely used in various electronic chips in future.

Key words: Computer modeling, nanotechnology, quantum mechanical calculations

Redaksiyaya daxil oldu: 26.11.2012-ci il

Çapa imzalandı: 12.12.2012-ci il.