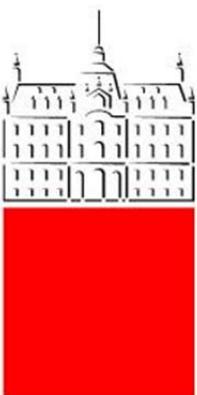


Univerza v Ljubljani
Fakulteta za *matematiko in fiziko*



Oddelek za fiziko

Seminar – 3. Letnik, I. Stopnja

PREVODNOST IN ELEKTROMAGNETNO SEVANJE BAKTERIJSKEGA DNA

Avtor: Gašper Glavan

Mentor: prof. dr. Rudolf Podgornik

Ljubljana, maj 2012

KAZALO:

1.	UVOD.....	3
2.	ELEKTRIČNA PREVODNOST DNA.....	3
2.1	PRIPRAVA MOKRO VLEČENIH DNA VLAKEN	3
2.2	KRIVULJE TOK-NAPETOST	4
2.3	MERITVE PREVODNOSTI V ODVISNOSTI OD TEMPERATURE	5
2.4	MEHANIZEM PREVAJANJA POSKOČNA VRZEL.....	7
3.	EM SEVANJE BAKTERIJSKEGA DNA	7
3.1	PRECESIJA MAGNETNEGA MOMENTA	8
3.3	PERIODIČNI TOK.....	9
3.4	EKSPERIMENT	10
3.5	POVZETEK	11
4.	LITERATURA	11

1. UVOD

Meritve kvazistatične in frekvenčne odvisnosti električne prevodnosti pod 1 MHz so opravili na mokro vlečenih vlaknih, makroskopsko orientirane Li-DNA. Frekvenčna odvisnost električne prevodnosti na območju $10^{-3} - 10^{15}$ Hz se zelo dobro ujema s teoretično napovedjo mehanizma poskočne vrzeli, medtem ko se temperaturna odvisnost zelo dobro opiše z Arrheniusovim zakonom.

Elektromagnetni signali lahko sprožijo kemijske reakcije na zelo velike razdalje. To je splošno znano za optične frekvence, npr: fotosintetske reakcije. Manj znano pa je, da v bakterijah nizko frekvenčni elektromagnetni signali nastanejo zaradi elektronskih prehodov med energijskimi stanji, ki opisujejo šibko vezano gibanje elektronov okrog zanke DNA. Znanstveniki domnevajo, da bakterije na ta način »brezžično« komunicirajo v bakterijskih skupnostih. Brezžično oddajanje signalov je lahko načeloma obeh AM in FM frekvenc, ki nastanejo kot posledica različnih periodičnih magnetnih pretokov v elektronskem energijskem spektru bakterijskega DNA.

2. ELEKTRIČNA PREVODNOST DNA

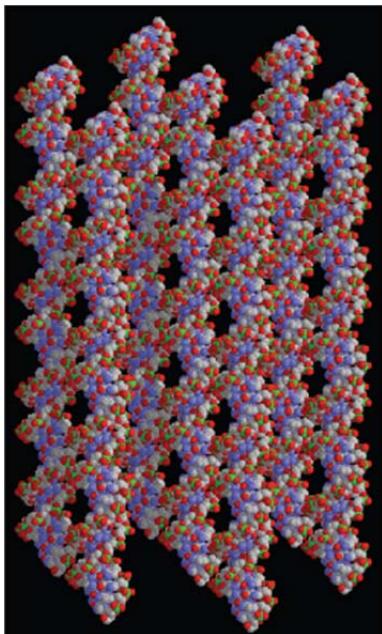
Kljud intenzivnim raziskavam narava mehanizma prenosa naboja ostaja nerazjasnjeno področje. Različne meritve kažejo tako na kratko kot na dolgosežne prenose, kot da se DNA lahko obnaša kot enodimenzionalna molekularna žica.

Graf enosmernega toka v odvisnosti od napetosti ($I-U$) kaže na nelinearno prevodnost glede na klasično linearne limite, ki jo opisuje Ohmov zakon. Mehanizmi prenosa naboja v DNA so očitno odvisni od vrste radikala ki je vezan na ta DNA. Na $I-U$ krivulja dobljena na dvojno napeti λ -DNA, kaže na obstoj temperaturno odvisnega polprevodniške napetostne vrzeli. Pokazano je bilo tudi, da pri zamenjavo imino protona na vsakem baznem paru s kovinskim ionom napetostna vrzel izgine. Tedaj izmerjena prevodnost je podobna prevodnosti izmerjeni na Zn-DNA.

V tem seminarju bom predstavil samo rezultate meritev kvazistatične temperaturno odvisne električne prevodnosti, pridobljenih na mokro vlečenih vlaken Li-DNA, v homogenem električnem polju in meritve frekvenčno odvisne prevodnosti pri nizkih frekvencah med 20 Hz in 1 MHz. Ti eksperimenti odlično dopolnjujejo že poročane visokofrekvenčne meritve. Model poskočne vrzeli se zelo dobro ujema meritvam frekvenčno odvisne električne prevodnosti na celotnem območju merjenja ($10^{-3} - 10^{15}$ Hz).

2.1 PRIPRAVA MOKRO VLEČENIH DNA VLAKEN

Mokro vlečeni makroskopsko orientirani vzorci Li-DNA so bili pripravljeni iz telečjega timusa (priželjc) z mokrim vrtenjem in nato sušenjem. Ta metoda omogoča nadzorovan proizvodnjo zadostnih količin makroskopsko usmerjenih v tanke sloje namotanih DNA



Slika 1: DNA v vzorcu

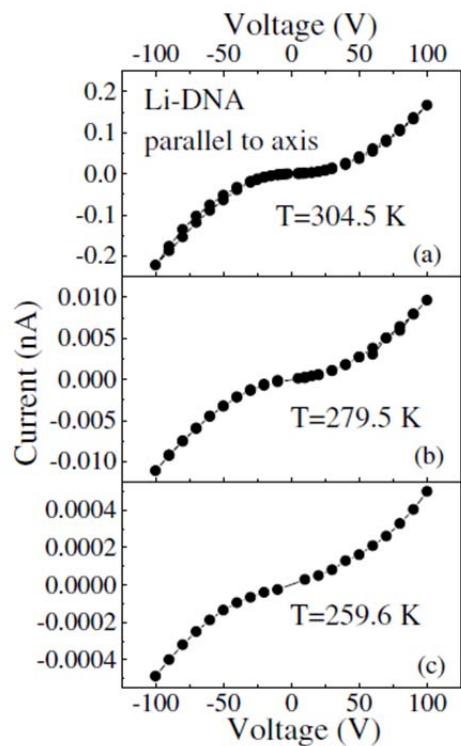
vlaken. Posušeni sloji Li-DNA so debeline okoli 3 - 4 mm in imajopovršino med 10 in 20 mm². Te sloje nato razrežejo pravokotno na orientacijsko os molekul DNA, ki jih pri meritvah prevodnosti uporabljajo v razsutem stanju vzorca.



Slika 2: Mokro vlečena vlakna DNA meritvah prevodnosti uporabljajo v razsutem stanju vzorca.

2.2 KRIVULJE TOK-NAPETOST

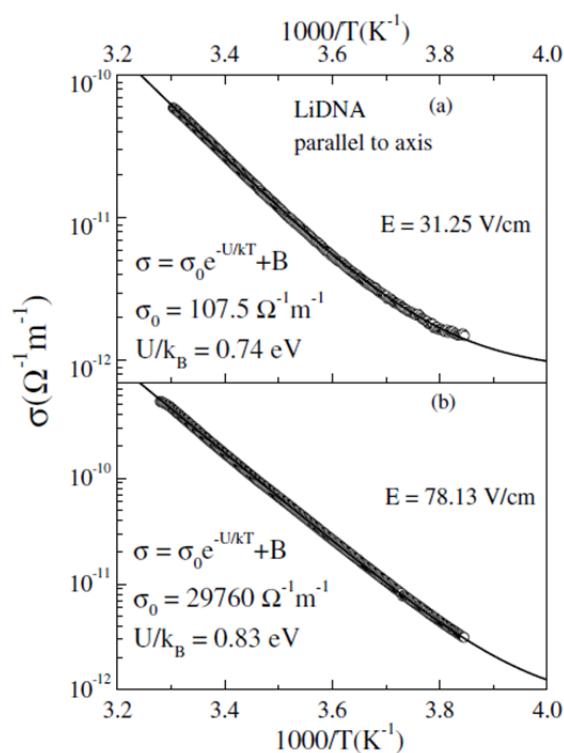
Tipične krivulje I-U merjene na vzorcih mokro vlečenih vlaknen Li-DNA. Na sliki 3 so meritve prikazane za tri različne temperature. Meritve na vzorcu mokro vlečenih vlaken Li-DNA ne kažejo vidne nivoje na krivulji I-U v skladu z dognanji o (Zn) λ -DNA. To kaže da je napetostna vrzel manjša od teoretične vrednosti pri sobni temperaturi. Če upoštevamo velikosti vzorcev ugotovimo, da se poljska odvisnost prevodnosti $\sigma_{||}(E)$ Li-DNA dobljeno iz podatkov s slike 3 kvantitativno sklada s podatki $\sigma(E)$ za (Zn) λ -DNA. Z zmanjšanjem temperature za približno 20 K, se električni tok pri določeni napetosti zmanjša za približno en velikostni red. To kaže na hitro povečevanje upornosti s padajočo temperaturo. Prav tako se skoraj linearno območje pri okoli 0 V potane bolj poševno z manjšajočo se temperaturo. Zdi se da so nelinearne krivulje I-U posledica električnega polja, induciranega zaradi povečanja števila nosilcev nabuja.



Slika 3: tokovne-napetostne krivulje merjene pri 75% relativne vlažnosti na vzorcu mokro vlečenih vlaken Li-DNA. homogeno električno polje je bilo vzporedni z orientacijsko osjo DNA

2.3 MERITVE PREVODNOSTI V ODVISNOSTI OD TEMPERATURE

Vpliv električnega polja na temperaturno odvisnost prevodnosti $\sigma_{||}(T,E)$ je bila preverjena z merjenjem upornosti med hlajenjem vzorca pri dveh različnih vrednostih jakosti električnega polja. Upornosti vzorca so zanesljivo sledili do okoli 220 K, pri dodatnem hlajenju pa je elektrometer začel presegati mejno vrednost okoli $10^{16} \Omega$. Slika 4 kaže temperaturno odvisnost $\sigma_{||}(T,E)$, izmerjeno pri napetosti 20 V ($E=31.25$ V/cm) in pri napetosti 50 V ($E=78.13$ V/cm). Podobno kot pri mikrovalovnih in optičnih frekvencah se $\sigma_{||}(T)$ močno zmanjša pod sobno temperaturo s prehodom na nasičeno konstanto pri 230 K. Izkaže se da je ta prehod predvsem posledica termočlenskega napetostnega offseta v meritvi upornosti zaradi neizogibnegatemperaturnega gradienta v svinčeni napeljavi. Ta offset

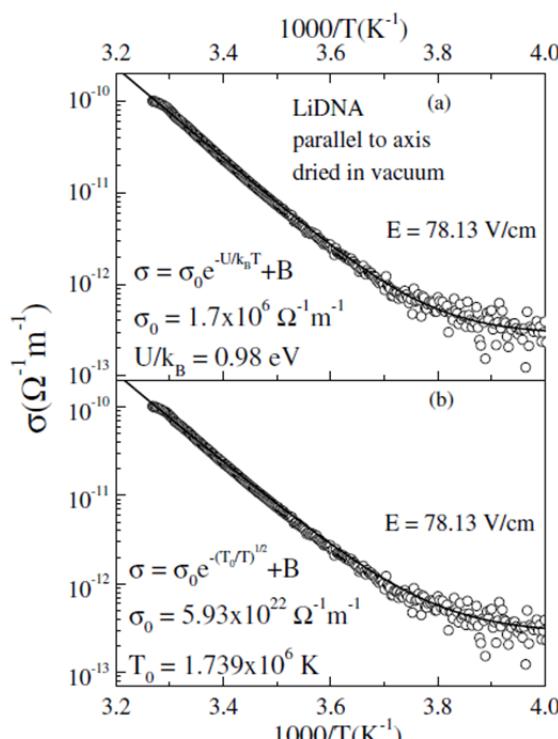


Slika 4: temperaturna odvisnost električne prevodnosti merjena pri 75% relativni vlažnosti mokro vlečene Li-DNA. Električno polje je bilo vzporedno na orientacijsko os vzorca

termočlena se kače v temperaturni odvisnosti kot skoraj konstantno ozadje (konstanta B na sliki 4), na ta način limitira k najnižji vrednosti električne prevodnosti. Temperaturno odvisnost lahko dobro opišemo s termalno aktivnim Arrheniusovim izrazom: $\sigma = \sigma_0 e^{-(\frac{U}{kT})}$ do približno 220 K, kjer upornost preseže mejno vrednost merilnega območja elektrometra.

Podatki predstavljeni na slikah 3 in 4 kažejo da se odvisnost električnega polja od σ skriva predvsem v prefaktorju σ_0 . Saj s povečanjem električnega polja za faktor 2.5 se σ_0 poveča za več kot 2 velikostna reda, medtem ko aktivacijska energija U ostaja znotraj eksperimentalne napake (0,05eV).

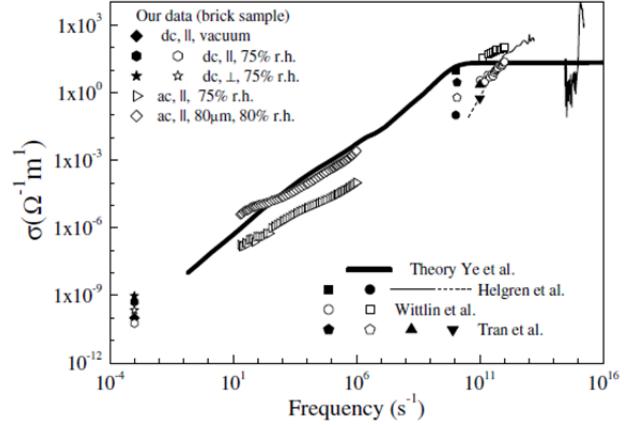
Slika 5 prikazuje meritve $\sigma(T,E)$ izvedene na Li-DNA sušene v vakuumu pri sobni temperaturi več kot 24 ur. Primerjajmo meritve



Slika 5: temperaturna odvisnost električne prevodnosti merjena na posušeni Li-DNA. Graf (a) je fitan z Arrheniusovim izrazom, graf (b) pa z izrazom, ki opisuje mehanizem poskočne vrzeli. Električno polje je bilo vzporedno na orientacijsko os vzorca.

prikazane na slikah 4(b) in 5(a), obe spremembi σ_0 in U sta pomembni. Čeprav se σ_0 poveča za nekaj manj kot 2 velikostna reda, se zdi da je povečanje U za 0.1 eV prevladujoč vpliv v zmanjšanju prevodnosti, kar podpira idejo, da je v okolju siromašnem z vodo, za nižjo prevodnost kriva manj običajna B oblika DNA, kot pa manjše število nosilcev naboja. Izraz ki dobro opisuje spremenljajoč domet modela poskočne vrzeli: $\sigma = \sigma_0 e^{-(T_0/T)^\beta}$ in je uporabljen pri prilagoditveni krivulji na sliki 5(b).

Če te kvazistatične meritve in nizkofrekvenčne meritve združimo z meritvami frekvenčne odvisnosti pri mikrovalovnih in optičnih frekvencah, dobimo graf kot je prikazan na sliki 6. Kjer so podatki med 20 Hz in 1 MHz (označeni z ac) predstavljajo effektivno prevodnost $\sigma(\omega) = \epsilon'' \epsilon_0 \omega$ s iz meritev sklepamo na imaginarni del ϵ'' kompleksne dielektrične konstante $\epsilon^* = \epsilon' - i\epsilon''$. To enostavno sklepanje je bilo možno, ker ni bilo najdenih drugih mehanizmov, ki bi prispevali dielektričnem spektru pod 1 MHz. Zdi se da se splošna frekvenčna odvisnost kvalitativno ujema s teoretično napovedjo, tudi ob predpostavki spremenljivega dometa mehanizma poskočne vrzeli. Pokazano je bilo, da vrzel brez dvoma prevaja med pari DNA baz na razdaljah večjih od 3.7 nm.

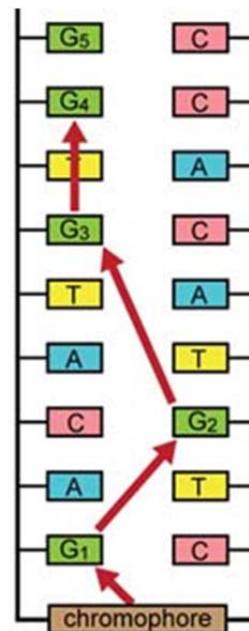


Slika 6: frekvenčna odvisnost prevodnosti pomerjena na vzoru mokro vlečenih vlaken DNA in na vzoru λ -DNA. Večino meritev je dobljenih pri različnih relativnih vlažnostih okolja v katerem se je vzorec nahajal. Krepka črna črta predstavlja napovedi modela. Ostale meritve pa so zbrane iz različnih meritev z različnimi usmerjenostmi električnega polja glede na makroskopsko orientacijsko os vzorca.

Skratka I-U meritve kažejo, da nelinearnost I-U krivulj lahko pripišemo induciranemu električnemu polju povzročenega zaradi povečanja števila nosilcev naboja. V nasprotnem primeru s prevodnostnimi meritvami na vzoru mokro vlečenih vlaken Li-DNA posušenem v vakuumu kažejo, da namesto manjšega števila nosilcev, močnejše lokalizacijske učinke povzroča manj redna B oblika DNA, ki je odgovorna za manjšo prevodnost v okolju siromašnem z vodo. Meritve prevodnosti podaljšane na kvazistatično časovno skalo in visoko frekvenčne meritve se ujemajo s teoretičnimi izračuni, ki temeljijo na prevodnostnem mehanizmu poskočne vrzeli.

2.4 MEHANIZEM PREVAJANJA POSKOČNA VRZEL

Poskočna vrzel je prenosa naboja, kjer vrzel nosi pozitiven nabolj prek gvanina do nukleobaze z najnižjim oksidacijskim potencialom. Preskakovanje vrzeli smatramo za superizmenjanje vmesnih interakcij prek dveh vmesnih AT baznih parov ocenjeno na velikostni red frekvence 10^9 Hz pri 300K. Maksimalna razdalja za preskakovanje vrzeli v dvojnem z gvaninom ločeno z enojnim AT baznim parom 300 ± 70 Å. Kljub temu srečamo siljenje za prenos vrzeliv DNA nastajajo iz stekila posredovanj AT baznih parov, elektronski prenos je pričakovani in je skoraj posledično neodvisen zaradi podobnosti v redukcijskih potencialih timina in citozina.



Slika 7: shema prevajanja

3. EM SEVANJE BAKTERIJSKEGA DNA

Biokemija je najpogosteje opisana v smislu kratko sežnih molekulskih preuređenih interakcija. Jasno je tudi, da fotonske biokemične reakcije prav tako obstajajo. Fotosinteza predstavlja zgled ključnega pomena. Fotoni, ki povzročajo te kemijske reakcije, imajo zelo oddaljen izvor – sonce.

Pokazano je bilo, da bakterijski DNA makromolekule oddaja elektromagnetne signale, ki so bili merjeni s indukcijsko tuljavo, v kateri se je v plastični epruveti nahajal bakterijski DNA v vodni raztopini.

NIZKO FREKVENČNO OZADJE

V režimu zelo nizkih frekvenc ($1 \text{ Hz} < (\omega/2\pi) < 20 \text{ Hz}$) se lahko pojavi spektralno ozadje zaradi elektronskih magnetnih momentov ki precesirajo v majhnem magnetnem polju. Tudi če zaščitimo magnetno polje zunanjih virov, toplotna nihanja tuljavskih tokov še vedno povzročajo frekvenčne motnje pri zelo nizkih signalih.

VISOKO FREKVENČNO OZADJE

V režimu nekoliko višjih frekvenc ($0.2 \text{ kHz} < (\omega/2\pi) < 5 \text{ kHz}$) je opaziti ostre vrhove v spektralnem ozadju. Sploča se upoštevati, da ima bakterijska DNA obliko zanke. V delu 3.2. bomo modulirali spekter gibanja skoraj prostih elektronov, ki se gibljejo v prostoru zanke dolžine L in rešili stacionarno Schrödingerjevo enačbo. Lastne vrednosti energije skoraj prostih elektronov so:

$$E_n = \left(\frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} \right) n^2; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1)$$

Pripadajoče frekvence prehoda med sosednjima nivojema so:

$$\omega_n = \frac{E_{n+1} - E_n}{\hbar} = (2n + 1)\varpi; \text{ kjer je } \varpi = \left(\frac{2\pi^2\hbar}{mL^2}\right) \quad (2)$$

MAGNETNI MOMENT

Orbitalni magnetni moment gibajočega elektrona okrog DNA zanke, se lahko razume kot: (a) povprečna hitrost elektronov gibajočih se okoli DNA zanke, določa električni tok:

$$I_n = \frac{ev_n}{L} = \left(\frac{2\pi e\hbar}{mL^2}\right) n; \quad I_n = \frac{e}{T_n} = ef_n = e\left(\frac{\varpi}{\pi}\right) n; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3)$$

kjer je $T_n = 1/f_n$ čas v katerem elektron enkrat obkroži zanko. (b) magnetni moment \mathbf{m} kroži po tokovni zanki okrog vektorskega območja Σ , kar pomeni da je povprečni magnetni moment:

$$\mathbf{m}_n = \frac{I_n \Sigma}{c} = \left(\frac{\hbar e}{2mc}\right) \left[\frac{4\pi\Sigma}{L^2}\right] n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4)$$

Če se biološki vzorec nahaja v magnetnem polju \mathbf{B} , je magnetni pretok oblike:

$$\Phi = \mathbf{B} \cdot \Sigma \quad (5)$$

In bo tekel skozi zanko DNA. Orbitalni elektronski energijski nivoji se periodično odzivajo na pretok, natančneje s periodo kvanta magnetnega pretoka:

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{|e|} \approx 4.13567 \times 10^{-7} \text{ Gauss cm}^2 = 41.3567 \text{ Gauss micron}^2 \quad (6)$$

Periodičnost energijskih nivojev je tako:

$$E_n(\Phi + \Phi_0) = E_n(\Phi) \quad (7)$$

Upoštevati je treba da je kvant magnetnega pretoka v enačbi (6) dvakratna vrednost kot pri superprevodnikih, kjer je vrednost naboja $q=2e$ (posledica elektronskih parov). Enačba (7) nam pove, da za merjenje kHz signalov, mora biti ozadje magnetnega polja zelo majhno.

3.1 PRECESIJA MAGNETNEGA MOMENTA

Če se netočkaso telo z magnetnim momentom \mathbf{m} nahaja v magnetnem polju \mathbf{B} , potem se pojavi precesija:

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = \gamma \mathbf{m} \times \mathbf{B} \quad (8)$$

Kjer je γ žiromagnetno razmerje. Za vzorec vode valjaste oblike s prostornino V v tuljavi, lahko za dano magnetno polje zapišemo ekviparticijski izrek v obliki:

$$\frac{VB^2}{8\pi} = \frac{k_B T}{2} \rightarrow B_T = \sqrt{\frac{4\pi k_B T}{V}} \quad (9)$$

Kjer je B_T ozadje tuljave. Številčno so magnetne frekvence ozadja v tuljavi:

$$f_T \approx 1.1 \text{ Hz} \sqrt{\left(\frac{\text{cm}^3}{V}\right) \left(\frac{T}{300^\circ\text{K}}\right)} \text{ (kroženje) in } f_T \approx 2.02 \text{ Hz} \sqrt{\left(\frac{\text{cm}^3}{V}\right) \left(\frac{T}{300^\circ\text{K}}\right)} \text{ (spin)} \quad (10)$$

Te številčne vrednosti so velikostnega reda z izmerjenimi vrednostmi (okoli 7 Hz) za razredčeno raztopino bakterijskega DNA v vodi. Vrednost magnetnega polja v enačbi (9) je natančna, če zunanje magnetno polje zelo natančno merimo.

3.2 ELEKTRONI V DNA ZANKI

Model Hamiltonove funkcije za gibanje skoraj prostih elektronov v prostoru DNA zanke z dolžino L :

$$H = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{d}{ds} - \frac{e}{c} A(s) \right)^2 + V(s), \quad V(s+L) = V(s) \text{ in } A(s+L) = A(s) \quad (11)$$

Vzamemo še valovno funkcijo periodično na obhod okoli DNA zanke:

$$\psi(s+L) = \psi(s) \quad (12)$$

Vektorski potencial zaključene zanke lahko zapišemo s periodično funkcijo:

$$A(s) = \frac{\Phi}{L} + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos\left(\frac{2\pi ns}{L} + \theta_n\right) \quad (13)$$

Hamiltonjan iz enačbe (11) lahko z robnimi pogoji zapišemo kot:

$$H = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{d}{ds} - \frac{e\Phi}{cL} \right)^2 + V(s); \quad V(s+L) = V(s) \text{ in } \psi(s+L) = \psi(s) \quad (14)$$

Povprečna dolžina DNA zanke za bakterijo *E. coli* je: $L=0.157733514$ cm. Če mobilni elektron gibajoč se okoli DNA v vodi začne preskakovati med baznimi pari vijačnice, to močno skrajša njegovo pot, kar se pozna na frekvenčnem spektru. Iz spektra so ugotovili približno dolžino elektronskega obhoda okoli DNA: $L \approx 0.086$ cm.

3.3 PERIODIČNI TOK

V splošnem spektralnem modelu, iz enačbe (14), se energija nivojev zviša, zaradi periodičnega magnetnega pretoka, ki ga podaja enačba (7). Različne bakterije sevajo različne spektre, odvisno od usmeritve DNA zanke v vektorskem območju Σ in magnetnega polja B . Iz periodičnega toka in induksijskega zakona:

$$E_n(\Phi + \Phi_0) = E_n(\Phi) \text{ in } V = -\frac{1}{c} \left(\frac{d\Phi}{dt} \right) \quad (15)$$

Dobimo modulirane robeve na elektronskem spektru frekvenc. Inducirana napetost določene iz indukcijskega zakona okoli DNA zanke da spremembo frekvence:

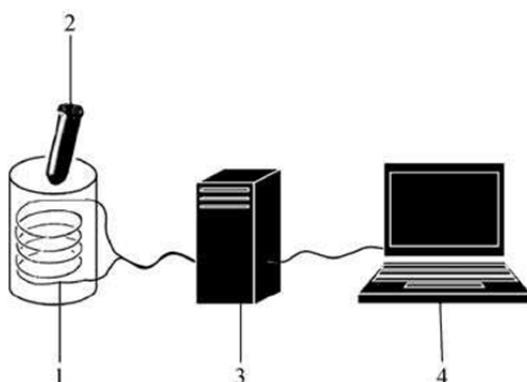
$$\omega_V = \frac{eV}{\hbar} \quad (16)$$

Zato se brezična komunikacija med bakterijami lahko prenaša z obema AM in FM oddajnima načinoma.

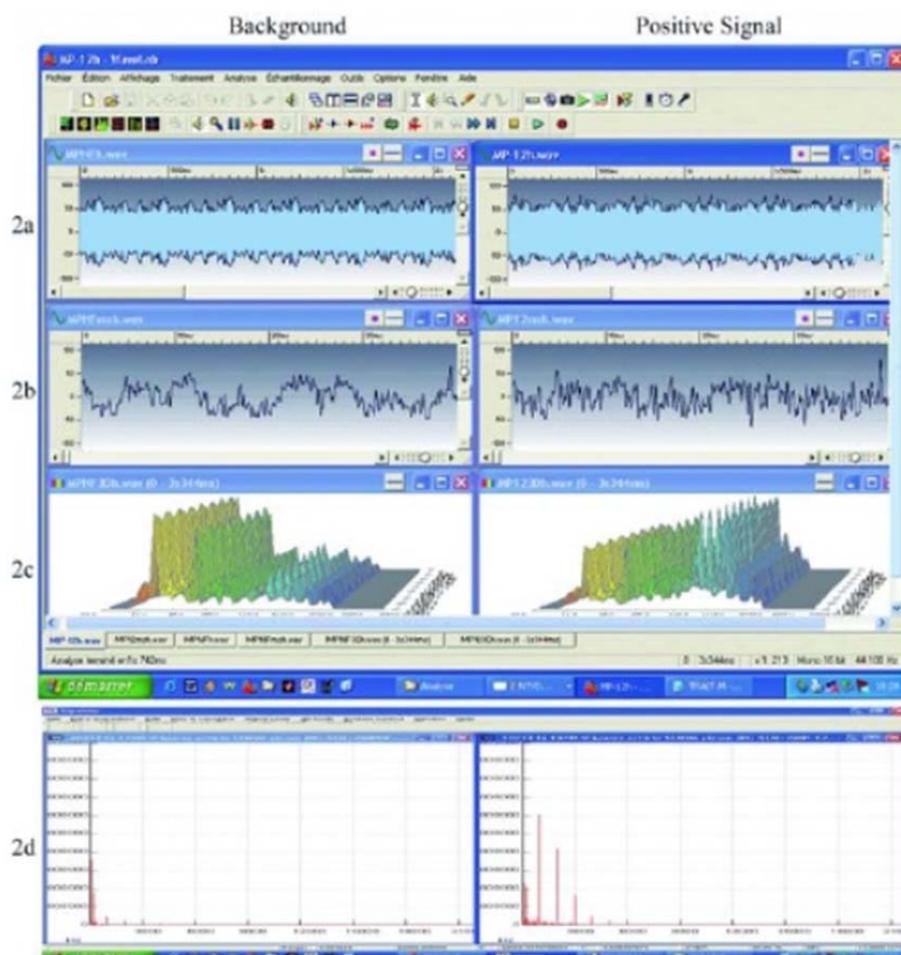
3.4 EKSPERIMENT

Shema eksperimentalne postavitve je v grobem izgledala: 1-indukcijska tuljava iz bakra; 2-vzorec v plastični epruveti; 3-ojačevalec; 4-računalnik.

Slika 9 prikazuje kako je meritev izgledala na ekranu, oz postopek obdelave podatkov:



Slika 8: postavitev eksperimenta



Slika 9: meritev na mikoplazmi pirum

- 2a - dejanska meritev (2 do 6 s)
- 2b - izčrpna analiza signala (skala v ms)
- 2c - 3D fourierjeva transformacija (abscisa: 0-20kHz ordinata: relativna intenziteta)
- 2d - spektralni pogled fourierjeve transformacije

Če so teoretične napovedi izkažejo za resnične, bo lahko mogoče dolžino DNA prisotnega v vzorcu neposredno določiti iz meritev frekvenčnega spektra. Žal pa ne moremo organizme opredeliti glede na njihovo dolžino DNA. Na ta način bi lahko tudi delno določali zgradbo DNA, kar bi imelo močne posledice v bioloških in medicinskih raziskavah. Zanimivo bi bilo ne samo „prisluškovati“ DNA, pač pa z uporabo zunanjih, časovno spreminjačih se polj vzbujati DNA v resonančne frekvence, kakšen učinek bi imelo tako vzbujanje na žive celice pa še zdaleč ni predvidljivo.

3.5 POVZETEK

Čeprav so biokemične reakcije pogosto opisane v smislu molekularnih stikov, lahko velikokrat elektromagnetne signale uporabimo za nadzor le teh z razdalje. Fotosintetske reakcije so klasičen primer reakcij, ki so nadzorovane preko širjenja elektromagnetnih signalov. Na veliko manjših frekvencah kot so optične so zaznali jasne elektromagnetne signale, ki se širijo v bakterijski skupnosti *E. coli*. Napisali so model, pri katerem ti signali nastanejo zaradi prehodov elektronov med energijskimi nivoji, ki so posledica šibkovezanega gibanja elektrona okoli DNA zanke. To oddajanje elektromagnetnih signalov je lahko obeh vrst AM in FM, ki je posledica periodičnega magnetnega pretoka v elektronskem energijskem spektru. AM frekvenčni signali se pojavijo pri elektronskih prehodih med energijskimi stanji. FM modulacija signala pa se pojavi z inducirano napetostjo indukcijskega zakona. Kontrolirano modulacijo frekvenc podaja enačba (16). Za razvozlanje informacij skritih v teh signalih bo potrebno še ogromno raziskav...

4. LITERATURA

- [1] A. Widom, J. Swain, Y. N. Srivastava, S. Sivasubramanian, *Electromagnetic Signals from Bacterial DNA*, General Physics
- [2] Z. Kutnjak, C. Filipič, R. Podgornik, L. Nordenskiöld, N. Korolev, *Electrical Conduction in Native Deoxyribonucleic Acid: Hole Hopping Transfer Mechanism?* PHYSICAL REVIEW LETTERS, volume 90, number 9, 2003
- [3] Z. Kutnjak, G. Lahajnar, C. Filipič, R. Podgornik, L. Nordenskiöld, N. Korolev, A. Rupprecht, *Electrical conduction in macroscopically oriented deoxyribonucleic and hyaluronic acid samples*, PHYSICAL REVIEW, 2005
- [4] <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC18351/>