

УДК 621.386:616-073.7 (045)

О. М. Ключко, канд. біол. наук, доц.,
А. О. Пашківський, студ.,
Д. Ю. Шеремет, студ.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДЕЯКИХ НАНОЕЛЕМЕНТІВ ДЛЯ РАДІОТЕХНІЧНИХ І ТЕЛЕВІЗІЙНИХ СИСТЕМ

Інститут електроніки та систем управління НАУ, e-mail: iesy@nau.edu.ua

На основі отриманих експериментальних та аналітичних даних про електроактивність мембран нейронів та молекулярних комплексів у їх складі, інших даних створено моделі функціонування деяких нанoeлементів для радіотехнічних і телевізійних систем.

Ключові слова: телевізійні системи, радіотехнічні системи, сигнали, електричні струми, нанотехнологія.

Вступ. У сучасну епоху нанотехнологій великий інтерес становлять фізичні ефекти в перспективних матеріалах і нанорозмірних структурах для створення компонентів електронної техніки. Такими структурами передусім є двовимірні структури у вигляді шарів наноскопічних розмірів, одновимірні – квантові нитки або дроти і нульрозмірні – квантові точки. Ряд авторів досліджували протягом багатьох років фізико-хімічні властивості живих систем [1 – 3], властивості високомолекулярних компонентів поверхневих мембран нейронів головного мозку ссавців (ГМС) [3 – 5] та передачу сигналів інформації в нейроні у напрямку поверхневої мембрана – білкові структури цитоплазми – молекула ДНК. Під час таких досліджень були проведені спостереження, які дозволяють розглядати ряд молекулярних структур у нейронах як природні аналоги деяких радіотехнічних і телевізійних пристроїв [1; 3]. Іншим напрямом досліджень наносвіту по праву вважають застосування молекулярних флуоресціюючих агентів, які можуть утворювати сполуки з молекулами [6] і в умовах експерименту візуалізувати ті чи інші процеси в складних біологічних системах. Сукупність результатів, отриманих у наведених експериментах, і були взяті за основу створення комп'ютерних моделей, що подані у цій роботі. При цьому розглянуті об'єкти – молекули каналорецепторних комплексів (КРК), мембрани нейронів (двовимірні плівки) та інші, можуть використовуватись у телевізійних, інших технічних системах майбутнього як різноманітні нанопристрої, такі як наногенератори, випрямлячі нанострумів, логічні елементи, елементи пам'яті тощо, а керування в таких системах можна реалізувати за допомогою імпульсів трансмембранних електричних хемокерованих струмів (ТЕХ струмів), які реєструвались у мембранах нейронів ГМС.

Розроблені нами комп'ютерні моделі можуть бути корисними для створення деяких функціональних блоків сучасних радіотехнічних і телевізійних систем. Наводимо дві моделі: 1) передавання електричного сигналу по молекулі ДНК як по нанопровіднику, 2) функціонування молекули глутаматного КРК (гКРК) як молекулярного генератора ТЕХ струму.

Постановка завдання. Дослідити фізико-хімічні властивості молекулярних комплексів поверхневих мембран нейронів – гКРК, на основі даних про електричні властивості ДНК створити комп'ютерні моделі передавання електричних сигналів по нанопровіднику ДНК та функціонування гКРК як молекулярного генератора струму.

Основна частина. Моделювання переміщення електричного сигналу по нанопровіднику ДНК. Молекули дезоксирибонуклеїнових кислот – це полімери, складені з мономерів-нуклеотидів, що закручені один навколо одного в подвійну спіраль, носії генетичної інформації організмів. У ДНК молекул виявили здатність добре проводити електричний струм, що теоретично дозволяє використовувати їх як нанопровідники. Така властивість дозволяє при створенні наносистем використовувати ДНК з тими функціями, які мають їх аналоги – електричні провідники у макросистемах.

Інформація про результати цього дослідження була опублікована Королівським хімічним товариством (Велика Британія). Автори цієї роботи виходили з тих експериментальних фактів, які свідчили, що при вміщенні ДНК у фосфатний буфер і подачі невеликої напруги зареєструвалося, що електрони дійсно переміщуються по ДНК. Дослідження показали, що провідність ДНК не змінюється у разі недостатності цукро-фосфатних складових молекули, але знижується вдвічі при «вирізання» з ланцюга азотистих основ. Ще одним «секретом» високої електропровідності ДНК виявилася щільна упаковка ниток на електроді – вона мінімізує можливість згинання і пошкоджень у структурі молекул.

Останнім часом було створено ряд нанопристроїв, в основі яких лежать властивості нитки ДНК. Так, у 2009 р. був розроблений вимірник кислотності клітини, що працює в межах значень рН 5,5 – 6,8. Подібні «лакмусові папірці» теоретично будуть необхідні як у фундаментальній науці, так і в експериментальній (наприклад, у медицині).

Грунтуючись на цій інформації, нами було створено модель візуалізації функціонування нанопровідника ДНК.

Припущення, покладені в основу моделі. Електричний сигнал переміщується вздовж нитки ДНК у вигляді потоку електронів по основах спіралі ДНК. Якщо розглянути сигнал, обмежений в часі, то можна припустити певну сукупність електронів, які переміщуються вздовж спіралі ДНК (фактично порцію електричного певного електричного сигналу, кратну кількості перенесених електронів). Найпростіше такі порції зарядів уявити у вигляді сплесків синусоподібного (косинусоподібного) сигналу (струму), у якому максимум амплітуди електричного сигналу (струму) пропорційний кількості електронів, що переносяться, і цей максимум досягається протягом певного фронту наростання сигналу від нуля до максимального значення амплітуди сигналу. Такий сигнал-сплеск може переміщуватись як у вигляді одиночних хвиль-сплесків, так і у вигляді серії послідовних сигналів. Описана робота є початковою, для створення наступних моделей необхідно буде врахувати додаткові параметри, важливі для моделювання цього процесу. Оскільки ця робота є першою із серії запланованих робіт з моделювання електричних характеристик ДНК, вибирався найпростіший сигнал з усієї сукупності можливих. Для спрощення вирішення завдання переміщення сигналу вважали частиною косинусоїдального сигналу з амплітудою від $y_{\min} = -1$ до $y_{\max} = 1$, тобто збудження переміщуються по ДНК як півперіод косинусоїди.

Вибір мови програмування. Для створення моделі «ДНК-нанопровідник» вибрано мову програмування JavaScript, а також мову розмітки тексту HTML і каскадні таблиці стилів CSS. Це було зроблено для підтримання кросплатформенності (вільна «міграція» програми на різних платформах, тобто в операційних системах) розробленої програми. JavaScript має властивості об'єктно-орієнтованої мови, але завдяки концепції прототипів підтримання об'єктів у ній вона відрізняється від традиційних мов об'єктно-орієнтованого програмування. Крім того, JavaScript має ряд властивостей, притаманних функціональним мовам, – функції як об'єкти першого рівня, об'єкти як списки, анонімні функції, що додає мові додаткової гнучкості. JavaScript має С-подібний синтаксис. Одна з популярних технологій, що дозволила зробити сторінки динамічнішими і забезпечити нові можливості – це динамічне завантаження і вставка даних у документ, що отримав назву AJAX. Програма була створена такими мовами програмування, як html5, CSS3 і JavaScript, ще й тому, що ми вважаємо, що, крім наведених вище аргументів, за ними майбутнє не лише індустрії розроблення сайтів, а й усього веб-програмування. Уже тепер використання настільних ПК зменшується настає ера планшетів і клаудсорсингових технологій. Це актуально, оскільки зручніше використовувати невеликий переносний комп'ютер, який міг би виконувати ту ж роботу, що і настільний ПК. У планшетах не буде великої кількості фізичної пам'яті в арсеналі, і майже всі звичні натеper операції будуть виконуватися в так званій «хмаринці», тобто на сервері, на якому кожен має певний простір, де зберігатимуться всі дані, програми,

фото. А для підвищення швидкодії і забезпечення зручності в користуванні, наразі розробники програмного забезпечення орієнтуються саме на html5, CSS3 і JavaScript.

Алгоритм роботи програми показано на рис. 1.

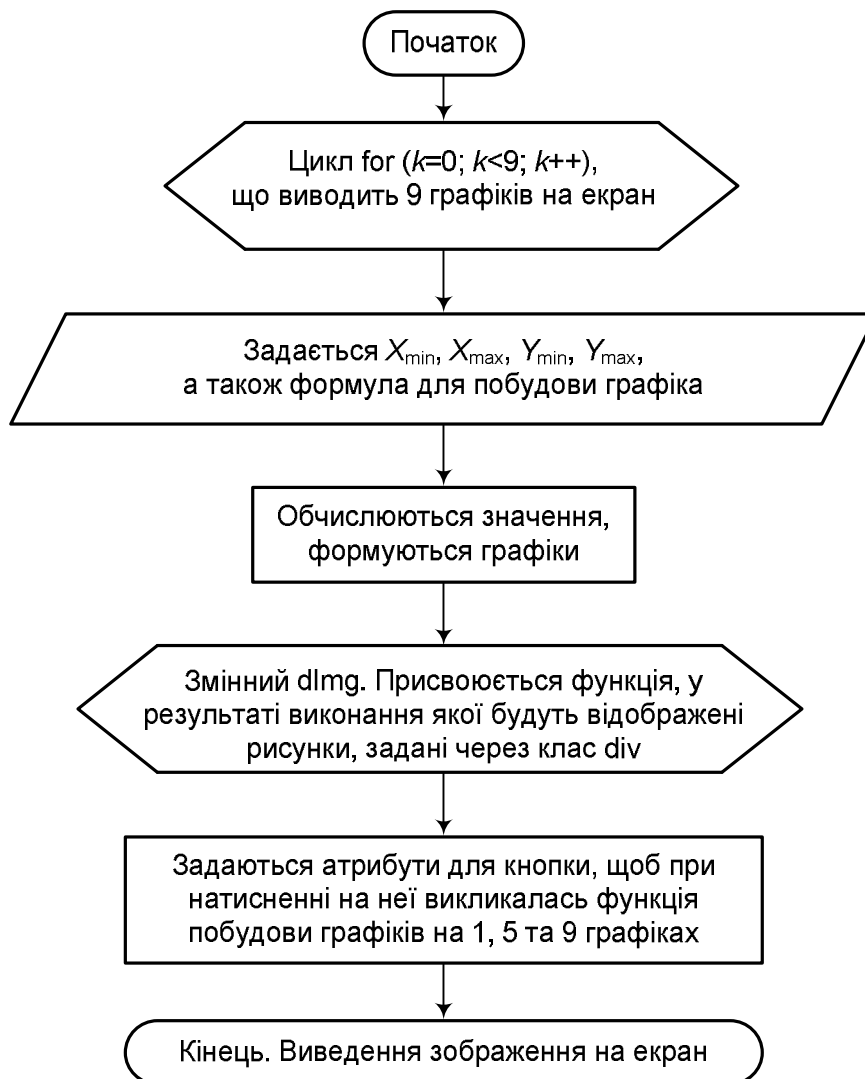


Рис. 1. Алгоритм програми, що моделює переміщення електричного імпульсу по ДНК-нанопровіднику

Опис моделі та алгоритма. Алгоритм виконання роботи. 1. Вибір мови програмування. 2. Позиціонування елементів майбутньої програми на сторінці. Спочатку сторінку поділили на блоки за допомогою тегів <div>, щоб легше керувати елементами, розміщеними всередині блоків. Розмістили всередині блоків картинку із зображеннями структури ДНК. За допомогою каскадних таблиць стилів (CSS) відформатували зовнішній вигляд сторінки. 3. Робота безпосередньо над самою програмою. Створено масив, у якому розміщується цикл for, який виводить 9 міні-графіків на екран. Тут же встановлено розміри графіків, рамки для них, межі, колір сітки і ліній графіка. 4. Виконання функції Draw, яка відповідає за побудову графіків. Задаються параметри X і Y , формула, за якою створюється зображення (рис. 3). 5. Задається змінна dimg, якій присвоюється функція, виводиться зображення на екран. 6. Останнім кроком була задана кнопка, що отримала назву «Draw». Саме при натисканні цієї кнопки можна спостерігати роботу програми.

Результат роботи програми. На рис. 2 показано початковий вигляд першого етапу роботи програми.

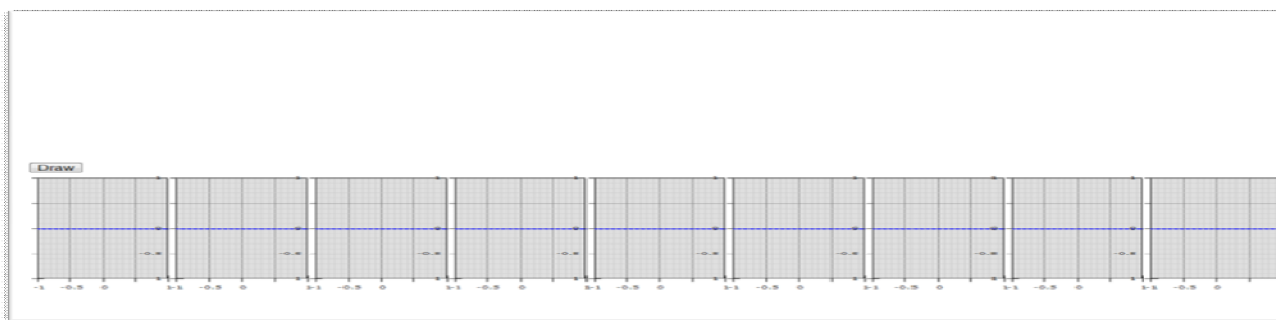


Рис. 2. Виведення на екран початкового етапу роботи програми

Результат виконання програми, який ініціюється натисканням кнопки Draw, показано на рис. 3.

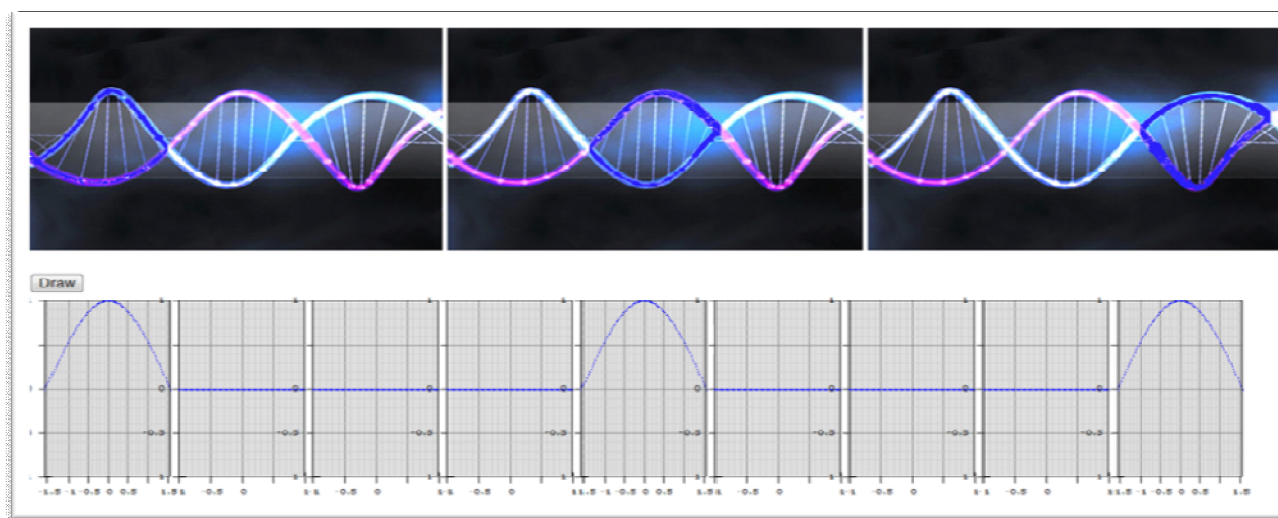


Рис 3. Робота програми (кінцевий результат)

Моделювання функціонування гКРК як керованого молекулярного генератора струму. У комп'ютерній анімаційній моделі, яку описано в цьому підрозділі, було відтворено функціонування гКРК як молекулярного генератора струму. Дійсно, згідно за працею [4], гКРК демонстрував ознаки, характерні для генератора струмів. Особливостями такого генератора є його нанорозміри (гКРК являє собою комплекс білкових молекул) та здатність активувати глутаматактивовані (Глу) та каїнатактивовані (КК) ТЕХ струми. Порядок проведення експериментів з реєстрації ТЕХ струмів в умовах фіксації потенціалу на мембрані не відрізнявся від описаного в працях [3; 5]. В основу моделі покладено дані дослідів, аналогічні описаним у працях [4; 5]. Функціонування гКРК досліджували в умовах фіксації потенціалу на мембрані. При цьому реєстрували вхідні глутамат- та каїнатактивовані ТЕХ струми. При дії на такі струми молекулярними блокаторами, наприклад JSTX-3, реєстрували зменшення вхідних струмів. З відмиванням блокатора амплітуда вхідного струму частково відновлювалася і згодом за повторної дії блокатора могла блокуватися знову. Такі цикли блокування-деблокування амплітуд ТЕХ струмів можна повторювати кілька разів; їх кількісні характеристики досліджено.

Зареєстроване явище можна розглядати як можливість молекулярного керування струмами через КРК на нанорівні. Записи струмів у одному з таких експериментів ілюструє рис. 4.

Незабарвленими прямокутниками відмічено періоди дії молекул КК на КРК, забарвленими – дія молекул JSTX-3.

На рис. 5 наведено зображення на інтерфейсі змодельованого КРК у початковій фазі до початку дії на нього молекул КК (що викликають вхідний струм через КРК) та молекул

JSTX-3 (які цей вхідний струм блокують). Модель «відпрацьовує» таким чином. Із натисканням кнопки «КК» на екрані молекула КК приєднується до зображення КРК і струмотворювальні заряди (іони) струмують через канал КРК. Натискання на іншу кнопку інтерфейсу «JSTX-3» зумовлює появу на екрані молекули блокатора струму, що приєднується до КРК, викликаючи зменшення кількості зображень струмоутворювальних іонів, що відповідає зменшенню амплітуди КК активованого струму. Із кожним актом натискання кнопки «JSTX-3» блокатор приєднується або від'єднується від рецептора на КРК. Натискаючи по чергово кнопки інтерфейсу, моделюємо реальний характер блокування ТЕХ струмів: на анімаційному зображенні КРК (рис. 5), на стрічці на екрані, де паралельно демонструється графічний запис змін амплітуд струмів, та на іншій стрічці на екрані, де змінам амплітуд струмів відповідає пропорційно інтенсивне забарвлення стрічки.

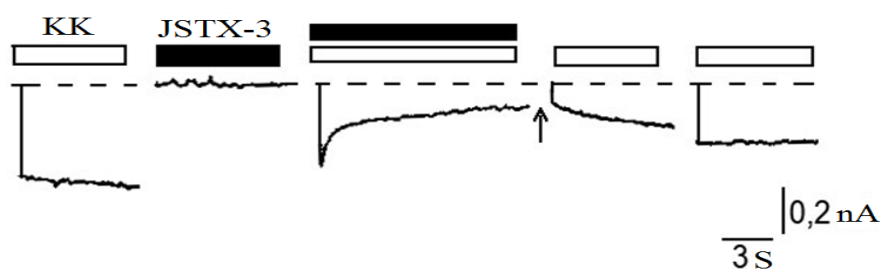


Рис. 4. Блокування молекулою JSTX-3 вхідних КК керованих електричних струмів через КРК

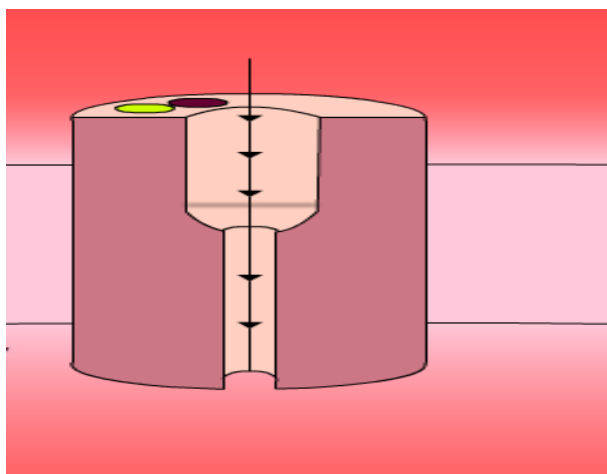


Рис. 5. Зображення на інтерфейсі змодельованого КРК у початковій фазі, до початку дії на нього молекул КК

Висновки. За результатами дослідження молекулярних структур щодо їх фізико-хімічних властивостей розроблено їх комп'ютерні моделі, які можуть бути корисними для створення деяких функціональних блоків сучасних радіотехнічних і телевізійних систем. Наведено дві моделі: передавання електричного сигналу по молекулі ДНК, як по нанопровіднику, та функціонування молекули глутаматного КРК (гКРК) як молекулярного генератора ТЕХ струму.

Показано, що деякі науковці та інженери розглядають полімерну молекулу ДНК як потенціальний нанопровідник у наноелектроніці. На підставі матеріалів останніх робіт у цій галузі зроблено спробу змодельовати процес переміщення електричного сигналу по ДНК нанопровіднику.

Під час розроблення цієї моделі виділено важливі параметри, які характеризують переміщення електричного сигналу вздовж ланцюга молекули ДНК.

Запропоновано модель, яка візуалізує переміщення електричного сигналу вздовж молекули ДНК нанопровідника.

Модель відображає функціонування молекули КРК у мембрані нейрона, у якій відтворено роль КРК як молекулярного генератора ТЕХ струмів. Керування роботою такого молекулярного наногенератора відбувається внаслідок дії на нього молекулою JSTX-3 – блокатором КК-активованих струмів.

Відзначено, що існує необхідність створення подібних моделей внаслідок недостатнього забезпечення програмними продуктами сучасного напрямку нанотехнологій під час їх викладання в університетах. Створені моделі можуть бути використані в навчальному процесі студентів, що вивчають нанотехнології та інші суміжні дисципліни. Особливо важливо те, що подібні моделі відображають застосування новітніх підходів нанобіоніки при розробленні нанопристроїв для радіотехнічних і телевізійних систем.

Список літератури

1. Чанг Р. Физическая химия с приложениями к биологическим системам / Р.Чанг. – М.: Мир, 1980. – 662 с.
2. Лев А. А. Моделирование ионной избирательности клеточных мембран / А. А. Лев. – Л.: Наука, 1976. – 210 с.
3. Сигворс Ф. Регистрация одиночных каналов / Ф. Сигворс, Б. Сакман, Э. Неер – М.: Мир, 1987. – 448 с.
4. *Pharmacological properties of amino – acid receptors in isolated hippocampal neurons* / [Krishtal O., Kiskin N., Tsyndrenko A., Klyuchko E.] // Walter de Gruyter – Berlin (Germany), *Receptors and ion channels*. – 1987. – P. 127–137.
5. *Akaike N. Spider toxin blocks excitatory amino-acid responses in isolated hippocampal pyramidal neurons* / N. Akaike, N. Kawai, N. I. Kiskin etc. // *Neuroscience Letters*. – 1987. – Vol. 79. – P. 127–137.
6. *Jabs R. Synaptic transmission onto hippocampal glial cells with hGFAP promoter activity* / R. Jabs, T. Pivneva, K. Huttman // *Journal of Cell Science*. – 2005. – Vol. 118. – P. 3791–3803.

Е. М. Ключко, А. А. Пашковский, Д. Ю. Шеремет

Компьютерное моделирование некоторых наноэлементов для радиотехнических и телевизионных систем

На основе полученных экспериментальных и аналитических данных об электроактивности мембран нейронов и молекулярных комплексов в их составе, других данных созданы модели функционирования некоторых наноэлементов для радиотехнических и телевизионных систем.

E. M. Klyuchko, A. O. Pashkivsky, D. Yu. Sheremet

Computer modelling of some nanoelements for radiotechnic and television systems

On the base of obtained experimental data about electrochemical properties of neuron membranes and molecular complexes in them, analytical and other data were developed the models of functioning of some nanoelements for radiotechnical and television systems.