

خواص ارتعاشی ماکرومولکول DNA در مدل های مختلف

حمزه موسوی^۱، سمیرا جلیلوند^{۲*}

^۱ ایران، کرمانشاه، باغ ابریشم، دانشگاه رازی، دانشکده علوم، ۶۷۱۴۱۱۵۱۱۱، دانشیار.

^۲ ایران، کرمانشاه، باغ ابریشم، دانشگاه رازی، دانشکده علوم، ۶۷۱۴۱۱۵۱۱۱، پژوهشگر پسادکتر.

*پست الکترونیکی نویسنده مسئول: samira.jalilvand@gmail.com

چکیده

خواص ارتعاشی مولکول DNA با استفاده از محاسبه‌ی منحنی پاشندگی و چگالی حالات فونونی مورد بررسی قرار گرفته است. این محاسبات با استفاده از تقریب هارمونیک و رهیافت تابع گرین انجام شده است. برای انجام این کار، مولکول DNA در سه مدل به نام‌های مدل استخوان ماهی، مدل نردبانی ۱ و مدل نردبانی ۲ شبیه‌سازی شده است. برای نزدیک شدن به رفتار مولکول DNA واقعی، اندازه‌ی یاخته‌ی واحد^۱ به تدریج افزایش می‌یابد به گونه‌ای که تعداد پایه‌های بیشتری را در برگیرد که این پایه‌ها به طور تصادفی در سیستم توزیع شده‌اند. پیوندهای بین زیرجایگاه‌ها توسط فنرهای خطی مدل می‌شوند به طوری که فنرهای عمودی نیز به طور تصادفی در طول مولکول‌ها توزیع شده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که افزایش طول یاخته و در نتیجه افزایش تعداد پایه‌ها، اثر توزیع تصادفی را در طیف ارتعاشی کاهش می‌دهد. همچنین مشاهده شد که در مدل نردبانی ۱ گاف انرژی وجود ندارد که سبب می‌شود این مدل از نظر نحوه واکنش به برانگیختگی‌های مکانیکی رفتار متفاوتی نسبت به دو مدل دیگر داشته باشد. این یافته‌ها می‌تواند برای مطالعه‌ی ویژگی‌های ارتعاشی ماکرومولکول‌های مشابه سودمند باشد.

کلمات کلیدی: خواص ارتعاشی؛ مولکول DNA؛ مدل استخوان ماهی؛ رهیافت تابع گرین.

۱- مقدمه

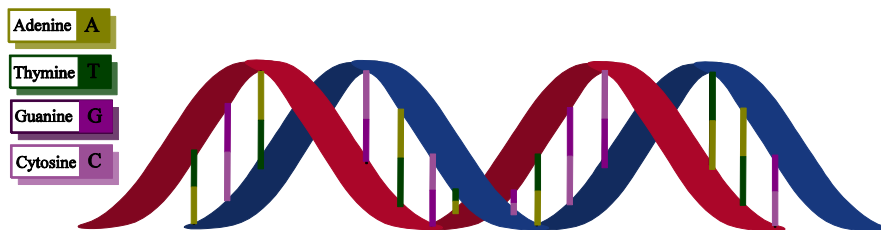
مولکول DNA یا دئوکسی‌ریبونوکلیئیک اسید^۲ که مسئول انتقال اطلاعات ژنتیکی است، نقش اساسی و مهمی را در زندگی بشر ایفا می‌کند. این نانوساختار به دلیل ویژگی‌های بسیار جالب توجهی مانند پایداری بالا، رسانش قابل کنترل، توانایی بالا در ذخیره‌سازی اطلاعات، قابلیت برنامه‌ریزی و مونتاژ خودبه‌خودی، مورد توجه دانشمندان زیادی قرار گرفته است و به همین دلیل

^۱ Unit Cell

^۲ DeoxyriboNucleic Acid

کاندیدای مناسبی برای استفاده در صنایع پزشکی و الکترونیکی می‌باشد [۱]. یکی از کاربردهای مهم این نانوساختار استفاده از آن در سنسورهای زیستی است. مولکول DNA به دلیل ماهیت هیبریدی که دارد، نسبت به سایر مواد، حساسیت بیشتری به عوامل محیطی دارد، از این رو گزینه‌ی مناسبی برای استفاده در سنسورها می‌باشد. سنسورهای مبتنی بر DNA، نتایج خوبی را روی نمونه‌های واقعی نشان داده‌اند، که آن را به ماده‌ای امیدوارکننده برای توسعه روش‌های تشخیص بیماری‌های مرتبط با نوکلئیک اسید تبدیل کرده است. در نتیجه مطالعه‌ی خواص و ویژگی‌های فیزیکی این ماکرومولکول در مدل‌های مختلف، به بهبود کاربرد این نانوساختار کمک بسیاری می‌کند.

مولکول DNA دارای دو رشته بسیار بلند است که به طور مارپیچ در کنار هم قرار می‌گیرند و ساختاری به شکل مارپیچ دوتایی^۳ را ایجاد می‌کنند که در شکل (۱) مشاهده می‌شود. این مولکول تمام کدها و اطلاعات ژنتیکی جانوران، گیاهان و حتی ویروس‌ها را حمل می‌کند که این اطلاعات برای رشد، تکامل، بقا، تولید مثل و سایر عملکردهای موجودات، حیاتی است. در واقع ابرمولکول DNA یک پلیمر بلند است که از توالی نوکلئوتیدها ایجاد شده است. هر نوکلئوتید از پایه‌های بازهای نیتروژنی، یک مولکول‌های قند ۵ کربنی (S)، و یک گروه فسفات (P) تشکیل شده است به طوری که یک باز آلی با پیوند کووالانسی به قند متصل می‌شود و یک گروه فسفات از سمت دیگر با پیوند کووالانسی به قند اتصال می‌یابد. دئوکسی‌ریبوز نام قند پنتوز و نوکلئیک اسید نشان دهنده‌ی فسفات و بازهای آلی موجود در مولکول است. بازهای آلی نیتروژن‌دار ساختار حلقوی دارند و به چهار شکل در مولکول DNA دیده می‌شوند: آدنین^۴ (A)، گوانین^۵ (G)، سیتوزین^۶ (C) و تیمین^۷ (T). به طور معمول این پایه‌ها همیشه به صورت جفت هستند به طوری که A همواره با T و C همواره با G جفت می‌شود. با وجود اینکه DNA با داشتن سه بخش قند، فسفات و بازهای نیتروژنی ساختمان ساده‌ای دارد، اما نحوه و ترتیب قرارگیری همین بازها باعث ایجاد پیچیدگی‌های بی‌شماری در این مولکول می‌شود، به طوری که همه تفاوت‌ها و تنوع در جانداران به دلیل ترتیب قرارگیری و توالی این بازها به وجود آمده است.



شکل ۱. ساختار شماتیک مولکول DNA

خواص الکترونی و مکانیکی ماکرومولکول DNA در دو حالت خشک و خیس (در محلول) به طور تجربی و تئوری مورد بررسی قرار گرفته است و نتایج متنوعی حاصل شده است [۶-۲]. کارهای انجام شده تئوری، شامل روش‌های ابتدا به ساکن (ab initio) و مطالعات بر مبنای تقریب تنگ‌بست^۸ می‌شود. هدف ما در این پژوهش این است که با استفاده از تقریب هارمونیک و تابع گرین خواص مکانیکی DNA را در مدل‌های متفاوت بررسی نماییم. مطالعه و بررسی خواص الکترونی و فونونی مولکول DNA برای طراحی و ساخت ابزارهای پزشکی مانند حسگرهای زیستی بسیار مفید است و می‌تواند به تشخیص سریع و کنترل بیماری‌ها کمک کند. امید بر این است روش‌هایی که در این پژوهش معرفی می‌شود برای بررسی سایر ماکرومولکول‌ها مانند پروتئین‌ها و مولکول RNA نیز به کار رود. در بخش دوم مقاله، مدل‌های به کار رفته برای مطالعه‌ی این مولکول را ارائه خواهیم داد. سپس در بخش سوم به فرمول‌بندی کار

^۳ Double-Helix

^۴ Adenine

^۵ Guanine

^۶ Cytosine

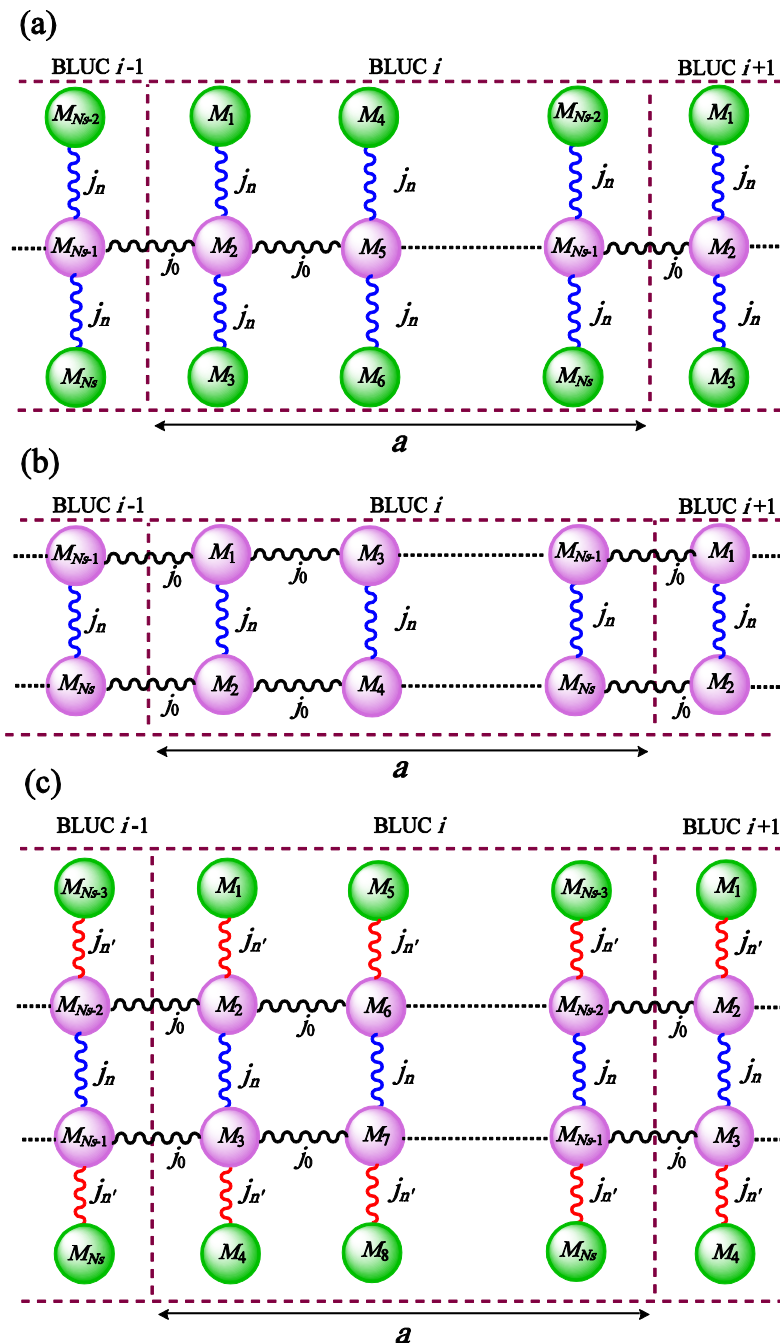
^۷ Thymine

^۸ Tight-binding approximation

می‌پردازیم و معادله‌ی حرکت برای تابع گرین را معرفی می‌کنیم که با استفاده از آن چگالی حالت‌های فونونی محاسبه خواهد شد. سپس، در بخش چهارم، در مورد داده‌های به دست آمده بحث می‌کنیم و نتیجه‌گیری را ارائه می‌دهیم.

۲- مدل

مطابق شکل (۲)، سه مدل برای بررسی DNA یعنی مدل استخوان ماهی^۹ (FBM)، مدل نردبانی^{۱۰} (1DSM) و مدل نردبانی ۲ (2DSM) را در نظر گرفته‌ایم.



شکل ۲. مدل‌های مختلف DNA: (a) مدل استخوان ماهی (FBM) (b) مدل نردبانی ۱ (1DSM) (c) مدل نردبانی ۲ (2DSM)

^۹ Fishbone Model (FBM)

^{۱۰} Double-strand Model (DSM)

در مدل استخوان ماهی (FBM)، جفت-پایه‌های نیتروژنی به صورت زنجیره‌ای متوالی از جرم‌ها در نظر گرفته می‌شوند که به صورت تصادفی در طول رشته‌ی DNA توزیع شده‌اند. در این مدل، ستون فقرات قند-فسفات (SP backbone) نیز به صورت مجموعه‌ای از جرم‌ها در بالا و پایین ساختار مشخص شده‌اند که به صورت پیوندهای عمودی به جفت پایه‌ها متصل هستند ولی خودشان اتصالی با یکدیگر ندارند. همان‌طور که در شکل (۲) دیده می‌شود، مدل نردبانی ۱ (1DSM) ساختاری شبیه به نردبان دارد که از دو شاخه‌ی جرمی تشکیل شده است، هر زیرجایگاه، یک پایه‌ی نیتروژنی به علاوه‌ی ستون فقرات قند-فسفات را نشان می‌دهد. در مدل نردبانی ۲ (2DSM)، چهار شاخه جرمی داریم، دو شاخه وسط نماینده‌ی پایه‌های نیتروژنی هستند و شاخه‌های بیرونی نشان‌دهنده‌ی ستون فقرات قند-فسفات هستند. در واقع می‌توان گفت مدل نردبانی ۲ ترکیبی از مدل استخوان ماهی و مدل نردبانی ۱ است. در همه‌ی این مدل‌ها پتانسیل برهم‌کنش بین جرم‌ها به صورت فنرهای افقی و عمودی که از قانون هوک تبعیت می‌کنند شبیه‌سازی شده است. برای بررسی خواص ارتعاشی DNA این ماکرومولکول را به شکل ساختار شبه یک بعدی با طول بی‌نهایت در نظر می‌گیریم که شامل یاخته‌های واحد شبکه‌ی براوه است. هر یاخته تعداد مشخصی از جفت-پایه‌های نیتروژنی را در برمی‌گیرد که به طور تصادفی در طول این رشته‌ی مولکولی توزیع شده‌اند. به علاوه برای نزدیک‌تر شدن نتایج به DNA واقعی مرحله به مرحله طول یاخته‌های واحد را افزایش می‌دهیم به گونه‌ای که پایه‌های بیشتری را شامل شوند. محاسبات را در چهار مرحله ۱۶، ۳۲، ۶۴ و ۱۲۸ جفت-پایه در هر یاخته انجام می‌دهیم.

۳- فرمولبندی

همان‌طور که در شکل (۲) نشان داده شد، نیروهای برهم‌کنشی بین جایگاه‌ها در رشته‌های DNA به صورت فنرهای خطی که از قانون هوک تبعیت می‌کنند، در نظر می‌گیریم. ارتعاش این جایگاه‌ها از طریق تقریب هارمونیک بررسی می‌شوند. هامیلتونی سیستم ارتعاشی در این چارچوب به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N_c} \sum_{\mu=1}^{N_d} \sum_{\alpha=1}^{N_s} \frac{\hat{p}_{\mu}^{\alpha 2}(i)}{2M_{\alpha}(i)} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N_c} \sum_{\mu,v=1}^{N_d} \sum_{\alpha,\beta=1}^{N_s} K_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(i,j) \hat{x}_{\mu}^{\alpha}(i) \hat{x}_{\nu}^{\beta}(j) \quad (1)$$

که در آن $M_{\alpha}(i)$ جرم زیرجایگاه α در یاخته‌ی واحد i ام است. $\hat{p}_{\mu}^{\alpha}(i)$ و $\hat{x}_{\mu}^{\alpha}(i)$ به ترتیب عملگرهای اندازه حرکت و جابجایی زیرجایگاه α در یاخته‌ی پایه‌ی i ام در جهت مختصات کارتزینی μ هستند. در رابطه (۱)، N_c برابر تعداد یاخته‌های واحد در شبکه مستقیم و تعداد مدها در منطقه اول بریلوئن در فضای وارون است. N_d نشان دهنده‌ی ابعاد سیستم است که در این جا تمام مدل‌های مورد بررسی ما یک بعدی هستند. تعداد زیر جایگاه‌ها در سیستم‌ها با N_s نشان داده شده است که برای مدل استخوان ماهی $N_s = 3N_{bp}$ ، برای مدل نردبانی ۱ $N_s = 2N_{bp}$ ، و برای مدل نردبانی ۲ $N_s = 4N_{bp}$ است. که در این‌ها، N_{bp} برابر تعداد جفت-پایه‌های نیتروژنی در DNA می‌باشد. به علاوه، در رابطه (۱)، $K_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(i,j)$ تانسور ثابت نیروی فنر است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$K_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(i,j) = \left[\frac{\partial^2 U}{\partial x_{\mu}^{\alpha}(i) \partial x_{\nu}^{\beta}(j)} \right] \quad (2)$$

که در آن U پتانسیل برهم‌کنشی سیستم است. با انجام یک سری محاسبات معادله‌ی حرکت برای تابع گرین به صورت زیر به دست می‌آید [۷]:

$$\sum_{l=1}^{N_c} \left[\delta_{il} \omega^2 \hat{I} - \hat{J}(i,l) \right] \hat{D}(l,j;\omega) = \delta_{ij} \hat{I} \quad (3)$$

که در رابطه‌ی بالا \hat{I} ماتریس یکه است، $\hat{J} = \hat{M}^{-1/2} \hat{K} \hat{M}^{-1/2}$ و \hat{D} ماتریس تابع گرین هستند. با استفاده از رابطه‌ی (۳) و تبدیل فوریه به فضای وارون، تابع گرین فونونی برابر می‌شود با:

$$\hat{D}(q; \omega + i0^+) = \left[(\omega + i0^+)^2 \hat{I} - \hat{J}(q) \right]^{-1} \quad (4)$$

$J(q)$ ماتریس دینامیکی در فضای بردار موج q است که عناصر آن برابر هستند با:

$$J_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(\vec{q}) = \frac{1}{N_c} \sum_{i,j=1}^{N_c} \frac{K_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(i,j) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)}}{\sqrt{M_\alpha(i) M_\beta(i)}} \quad (5)$$

در رابطه بالا \vec{R}_i و \vec{R}_j موقعیت یاخته‌های i و j را نشان می‌دهند. با استفاده از رابطه (۵) ماتریس‌های دینامیکی برای مدل‌های معرفی شده محاسبه می‌شوند. ابعاد این ماتریس‌ها برابر با N_s می‌باشد. به طور مثال برای مدل نردبانی ۲ با ۱۲۸ جفت پایه در یاخته، یک ماتریس ۵۱۲ بعدی خواهیم داشت.

با داشتن تابع گرین می‌توانیم چگالی حالات فونونی را از رابطه‌ی زیر به دست آوریم [۸]:

$$\text{DOS}(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \text{Tr Im} \hat{D}(\omega + i0^+) \quad (6)$$

هم‌چنین طیف پاشندگی به صورت عددی از رابطه‌ی زیر محاسبه می‌گردد، یعنی با داشتن ماتریس دینامیکی و به دست

آوردن ویژه مقادیر این ماتریس، منحنی پاشندگی حاصل می‌شود:

$$\left| \omega^2 \hat{I} - \hat{J}(\vec{q}) \right| = 0 \quad (7)$$

پس به طور کلی، ابتدا با استفاده از رابطه‌ی (۵) ماتریس دینامیکی را برای سیستم‌های مورد نظرمان محاسبه می‌کنیم، سپس

با استفاده از رابطه‌ی (۴) ماتریس‌های تابع گرین را به دست می‌آوریم و در نهایت با داشتن ماتریس تابع گرین و ماتریس دینامیکی با

استفاده از روابط (۶) و (۷) چگالی حالات فونونی و طیف ارتعاشی برای سه مدل مختلف DNA با ۱۶، ۳۲، ۶۴ و ۱۲۸ جفت-پایه قابل محاسبه هستند.

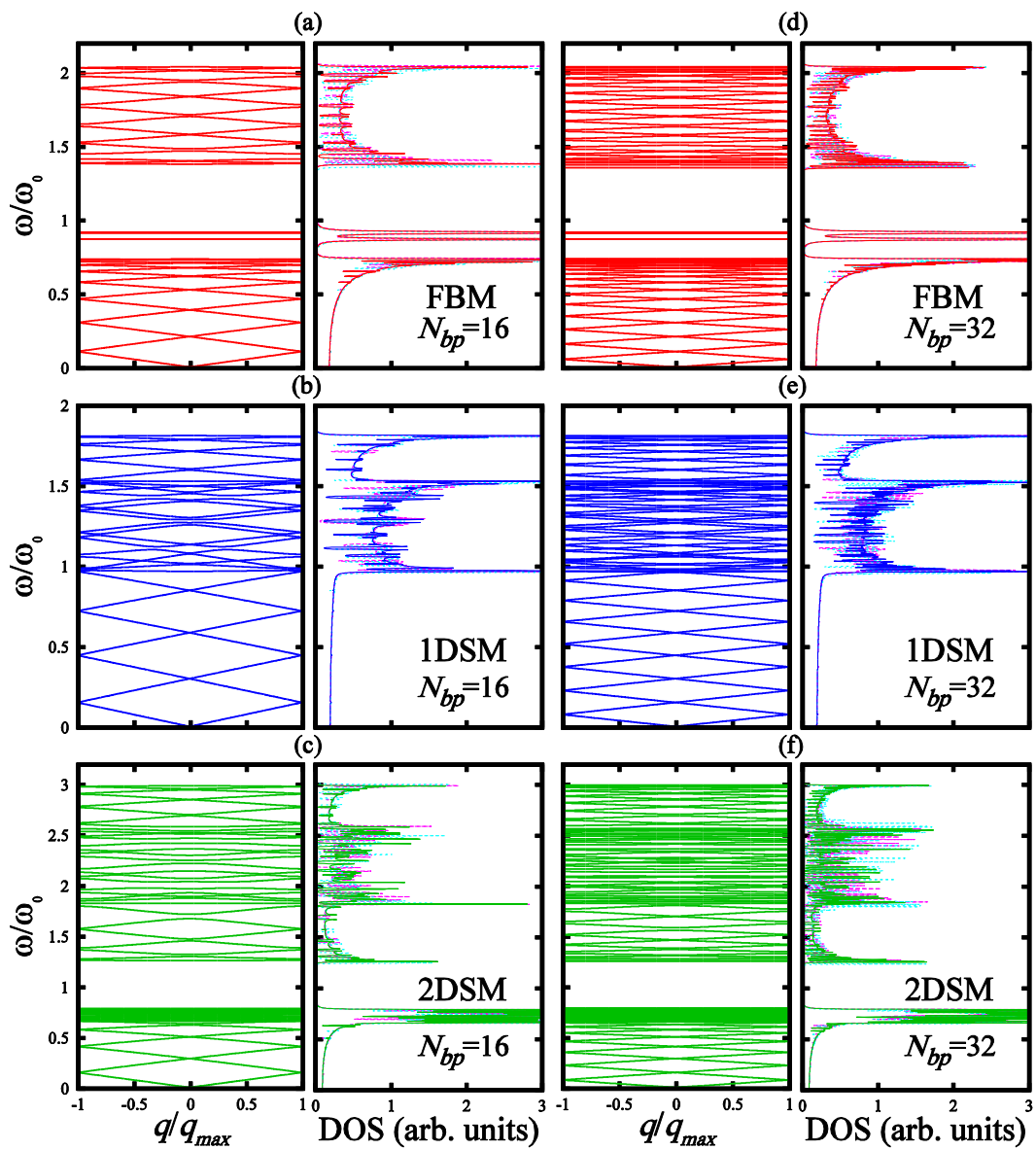
۴- بحث و نتیجه‌گیری

روابط و چارچوبی را که در بخش قبلی ارائه نمودیم برای بررسی طیف ارتعاشی مولکول DNA در مدل‌های مختلفی که در بخش دوم معرفی شد، به کار گرفتیم. در هر سه مدل ارائه شده، جرم‌ها و در واقع یعنی پایه‌ها به صورت تصادفی در طول زنجیره‌ها توزیع شده‌اند. ابتدا لازم است که پارامترهای مورد نیاز برای انجام محاسبات عددی را معرفی نماییم. مدل استخوان ماهی شامل سه جرم مختلف است: جرم جفت پایه‌ی AT، جرم جفت پایه‌ی CG و جرم ستون فقرات قند-فسفات. این جرم‌ها توسط سه فنر مختلف به یکدیگر متصل شده‌اند. ما در محاسباتمان، ثابت فنرهای افقی را با J_0 نشان می‌دهیم که جفت پایه‌ها را به یکدیگر متصل کرده است. هم‌چنین ثابت فنرهایی که جفت پایه‌های AT را به ستون فقرات قند-فسفات متصل کرده است با J_1 و ثابت فنرهایی که جفت پایه‌های CG را به ستون فقرات قند-فسفات متصل کرده است را با J_2 نشان می‌دهیم. مدل نردبانی ۱، شامل چهار جرم می‌شود که همان پایه‌های نیتروژنی A، T، C و G به علاوه‌ی جرم ستون فقرات قند-فسفات هستند. در این‌جا نیز سه نوع فنر مختلف وجود دارد، J_0 مربوط به فنرهای افقی است و J_1 و J_2 ثابت فنرهایی هستند که به ترتیب پایه‌های A را به T و پایه‌های C را به G وصل می‌کنند. در مدل نردبانی ۲، پنج جرم مختلف وجود دارد که چهار جرم همان پایه‌های نیتروژنی هستند و جرم پنجم ستون فقرات قند-فسفات است که در این مدل در مقایسه با مدل نردبانی ۱ به عنوان یک جرم مجزا از پایه‌های نیتروژنی جدا شده است. این مدل پنج نوع فنر مختلف J_0 ، J_1 ، J_2 ، J_3 و J_4 را شامل می‌شود که دو فنر J_3 و J_4 فنرهای عمودی هستند که پایه‌ها را به ستون فقرات قند-فسفات متصل می‌کنند. مقادیر این جرم‌ها در جدول (۱) ارائه شده است [۹]. ما از دو ثابت فنر استفاده کرده‌ایم که برابرند با [۱۰]: $J_0 = 0.090 \text{mdyn} / \text{Å}$ و $J_1 = 0.075 \text{mdyn} / \text{Å}$. هم‌چنین، ثابت فنرهای J_2 ، J_3 و J_4 را بر حسب J_0 به ترتیب به صورت $0.75J_0$ ، $0.70J_0$ و $0.60J_0$ تعریف می‌کنیم. این نکته باید ذکر شود که در محاسباتمان، مقدار جرم ستون فقرات قند-

فسفات در DNA و ثابت فنر j_0 را برابر واحد در نظر گرفته‌ایم. همچنین، برای اینکه محورهای فرکانس و بردار موج بدون بعد شوند، روابط $\omega_0 = \sqrt{j_0/M_0}$ و $q_{\max} = \pi/a$ را تعریف کرده‌ایم.

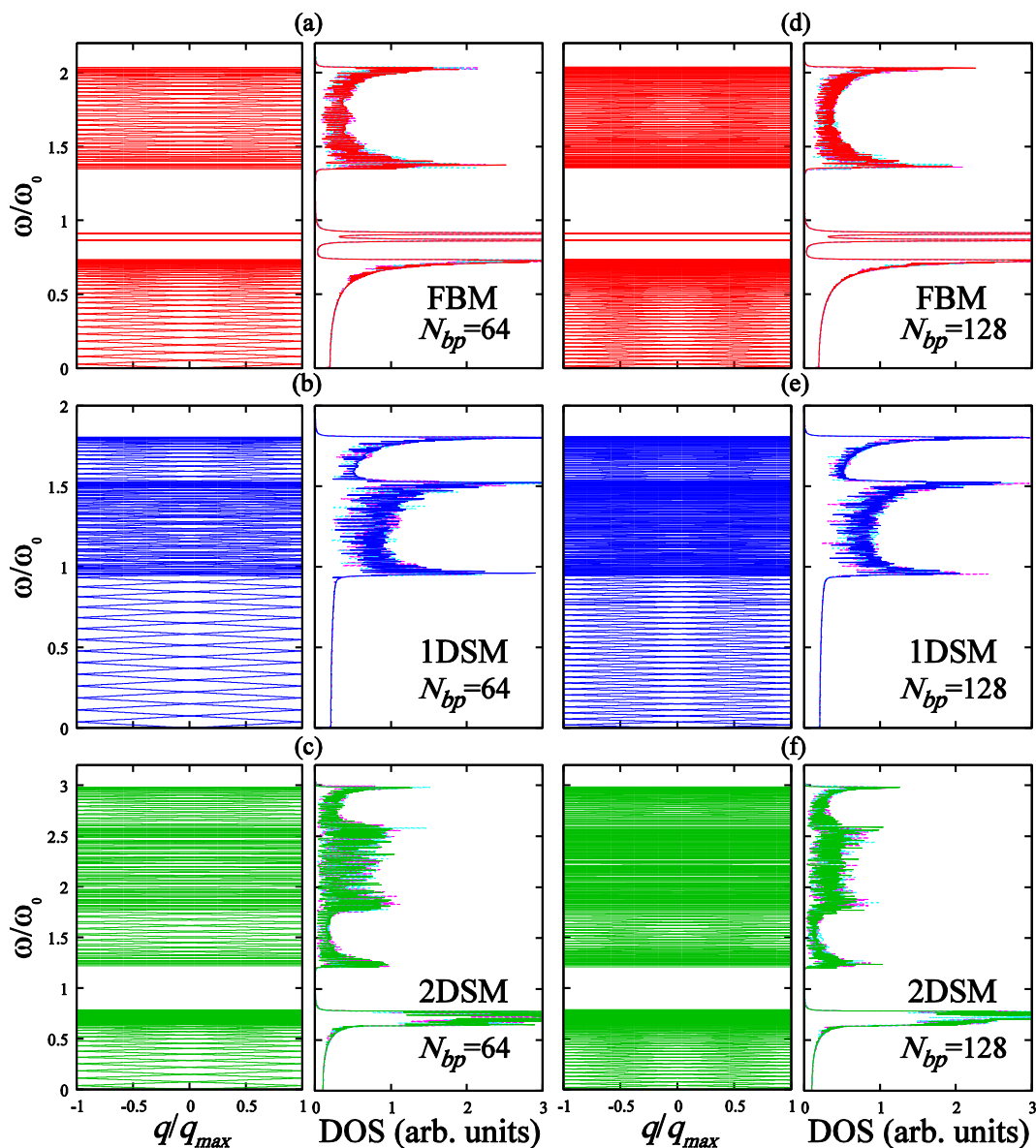
جدول ۱. جرم هر یک از پایه‌ها [۹]

جرم (a.m.u)	پایه
۱۳۴/۱۲۲۶	A
۱۲۵/۱۱۰۴	T
۱۱۰/۰۹۷۷	C
۱۵۰/۱۲۲۶	G
۹۵/۹۸۱۷	P
۸۳/۱۱۲۸	S



شکل ۳. چگالی حالت‌های فونونی و طیف پاشندگی مولکول DNA با ۱۶ و ۳۲ جفت-پایه.

طیف ارتعاشی مولکول DNA برای سه مدل معرفی شده در شکل‌های (۳) و (۴) رسم شده است. به منظور نمایش شکل تصادفی پایه‌ها و شبیه‌سازی هر چه بهتر مولکول‌های واقعی، اندازه‌ی یاخته‌ی پایه را در چهار مرحله افزایش داده‌ایم ($N_{bp} = 16, 32, 64, 128$). به ازای یک تعداد جفت-پایه‌ی مشخص، طول یاخته‌های واحد در مدل‌های مختلف با هم برابر است ولی تعداد زیر جایگاه‌ها یا جرم‌ها در مدل‌های مختلف با هم متفاوت است ($N_s = 3N_{bp}$ برای مدل استخوان ماهی، $N_s = 2N_{bp}$ برای مدل نردبانی ۱، و $N_s = 4N_{bp}$ برای مدل نردبانی ۲). در هر دو شکل (۳) و (۴)، طیف پاشندگی در سمت چپ و منحنی چگالی حالات در سمت راست هر پانل دیده می‌شود. در هر یک از پانل‌ها، منحنی پاشندگی با منحنی چگالی حالات متناظرش به صورت هم‌رنگ رسم شده‌اند. همچنین برای مقایسه‌ی توزیع تصادفی پایه‌ها، دو منحنی چگالی حالات اضافی به ازای هر جفت-پایه برای توزیع‌های متفاوت نیز رسم شده است.



شکل ۴. چگالی حالت‌های فونونی و طیف پاشندگی مولکول DNA با ۶۴ و ۱۲۸ جفت-پایه.

همان‌طور که برای سیستم‌های شبه یک بعدی انتظار می‌رود، در طیف‌های ارتعاشی، یک شاخه‌ی صوتی و $N_s - 1$ شاخه‌ی نوری با یک گاف خیلی نازک بین شاخه‌ی صوتی و اولین شاخه‌ی نوری مشاهده می‌شود. همچنین، دیده می‌شود که طیف ارتعاشی در

مدل‌های استخوان ماهی و مدل نردبانی ۲ در مقایسه با مدل نردبانی ۱، تبهگنی^{۱۱} کمتری دارند. این پدیده می‌تواند به دلیل تقارن کمتر این مدل‌ها نسبت به مدل نردبانی ۱ باشد که منجر به کاهش تعداد شاخه‌های نوری در طیف ارتعاشی آن‌ها می‌شود. از طرف دیگر با افزایش تعداد پایه‌ها در یاخته‌ی پایه، تبهگنی شاخه‌های نوری افزایش می‌یابد. زیرا با افزایش تعداد پایه‌ها، احتمال اتفاق افتادن پایه‌های تکراری نیز افزایش می‌یابد که این منجر به افزایش تبهگنی سیستم‌ها می‌شود.

با توجه به شکل‌های (۳) و (۴)، در هر سه مدل بین شاخه‌های نوری تعدادی گاف نواری می‌توان دید ولی در دو مدل استخوان ماهی و مدل نردبانی ۲ گاف نواری بزرگی بین شاخه‌های نوری مشاهده می‌شود. این رفتار ارتعاشی متفاوت این مدل‌ها می‌تواند ناشی از در نظر گرفتن ستون فقرات قند-فسفات به عنوان یک جرم مجزا و همچنین توزیع جرم نامتقارن این مدل‌ها درون یاخته‌ها باشد. در همه‌ی منحنی‌ها برای مدل‌های مختلف، تفاوت‌هایی در نمودارهای چگالی حالات و طیف‌های ارتعاشی مشاهده می‌شود که می‌تواند ناشی از تفاوت در اندازه‌ی سیستم‌ها، ساختار آن‌ها یا توزیع تصادفی پایه‌ها باشد. ولی با این وجود، هر چند که ممکن است نمودارها برای پیکربندی‌های مختلف متفاوت باشند به ویژه برای تعداد کم پایه‌ها، ولی اندازه‌ی گاف‌های نواری ثابت می‌ماند. به دلیل اهمیت حالت‌هایی که بلافاصله بعد از گاف اتفاق می‌افتد، منطقی است که رفتار ارتعاشی یکسانی از سه مدل انتظار داشته باشیم اما در نظر گرفتن ستون فقرات قند-فسفات به عنوان یک جرم مجزا در مدل‌های استخوان ماهی و نردبانی ۲ منجر به رفتار متفاوتی از آن‌ها یعنی همان گاف‌های بزرگ می‌شود. با افزایش تعداد پایه‌ها برخی از گاف‌های مشاهده شده از بین می‌روند. در نتیجه اختلاف بین نمودارهای چگالی حالات برای توزیع‌های تصادفی مختلف با افزایش پایه‌ها، کاهش می‌یابد و وقتی اندازه‌ی ساختار به مولکول DNA واقعی نزدیک می‌شود این اختلاف از بین می‌رود. این موضوع بیان‌گر این است که با افزایش طول و در واقع افزایش پایه‌ها، اثر توزیع تصادفی کاهش می‌یابد. افزایش تدریجی اندازه‌ی سیستم‌ها، دقت مدل‌ها را بهبود می‌بخشد و سبب می‌شود که این مدل‌ها در تخمین ویژگی‌های مکانیکی مولکول‌های DNA واقعی مؤثرتر ظاهر شوند. یک رهیافت اولیه منطقی، ایجاد یک مدل با اندازه متوسط با تعداد مجموعه‌ای از پایه‌ها است که به‌طور تصادفی توزیع شده‌اند. این نه تنها تخمین طیف ارتعاشی را برای سیستم‌های بسیار طولانی بهبود می‌بخشد، بلکه باعث صرفه جویی در زمان محاسبات نیز می‌شود.

مراجع

1. T. Chakraborty, *Charge migration in DNA: perspectives from physics, chemistry, and biology*, Springer Science & Business Media, 2007.
2. E. Braun, Y. Eichen, U. Sivan, G. Ben-Yoseph, " Dna-templated assembly and electrode attachment of a conducting silver wire ", *Nature* 391, 775-778 (1998).
3. D. Porath, A. Bezryadin, S. D. Vries, C. Dekker, " Direct measurement of electrical transport through dna molecules ", *Nature* 403, 635-638 (2000).
4. H. Mousavi, S. Jalilvand, Sh. Sohrabi Sani, J. A. Lee Hartman, M. Grabowski, " Electronic properties of different configurations of double-strand dna-like nanowires ", *Solid State Communications* 319, 113974 (2020).
5. S. Jalilvand, R. Sepahvand, H. Mousavi, " Electronic behavior of randomly dislocated RNA and DNA nanowires: a multi-model approach ", *The European Physical Journal Plus* 137, 928, (2022).
6. H. Mousavi, M. Mirzaei, S. Jalilvand, " Mechanical response of double-stranded DNA to dynamic excitation ", *Journal of Vibration and Control* 29, 214-224 (2023).
7. H. Bruus, K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*, 2nd edn., University Press, UK, 2004.

^{۱۱} Degeneracy

8. M. S. Leonardo, R. Gutierrez, A. Pecchia, A. Croy, G. Cuniberti, " Quantum phonon transport in nanomaterials: combining atomistic with non-equilibrium green's function techniques ", *Entropy* 21, 735 (2019).
9. M. Peyrard, " Melting the double helix ", *Nature Physics* 2, 13-14 (2006).
10. J. W. Powell, G. S. Edwards, L. Genzel, F. Kremer, A. Wittlin, W. Kubasek, W. Peticolas, " Investigation of far-infrared vibrational modes in polynucleotides ", *Physical Review A* 35, 3929-3939 (1987).