

ترابرد اسپینی در زنجیره‌های DNA: رهیافتی به اسپین کالریترونیک با استفاده از لیزر

خلاصه

سهراب بهنیا^۱
فاطمه نعمتی^۲
سمیرا فتحی‌زاده^۳
مهدی خداوردی‌زاده^۴

مقدمه: ایجاد جریان‌های اسپینی به وسیله اعمال گرادیان دما توجه دانشمندان زیادی را به خود جلب کرده است. زمینه اسپینترونیک از اسپین الکترون برای ذخیره و پردازش اطلاعات استفاده می‌کند و اسپین کالریترونیک، جریان‌های اسپینی را به حرارت مرتبط می‌سازد. ما از DNA به عنوان مولکولی آلی برای بررسی پدیده اسپین کالریترونیک استفاده کرده‌ایم. در مطالعه حاضر به منظور ایجاد گرادیان دما از لیزر مادون قرمز استفاده شد. در این کار، ما توانستیم محدوده‌ای از میدان‌های خارجی را که در آن بیشترین جریان اسپینی تولید می‌شود، به دست آوریم. بدین ترتیب می‌توانیم از زنجیره‌های DNA به عنوان یک ابزار اسپینترونیک برای انتقال اطلاعات امن در محیط‌های بیولوژیکی استفاده کنیم.

روش بررسی: با در نظر گرفتن مدل PBH تصحیح‌یافته نسبت به درجه آزادی اسپین، به بررسی ترابرد اسپینی مولکول DNA در حضور گرادیان دما و عوامل خارجی دیگر از جمله میدان الکتریکی و مغناطیسی پرداخته شد. گرادیان دما از طریق لیزر مادون قرمز به سیستم اعمال شد. برای تحلیل سیستم از رهیافت آشوب استفاده شد.

یافته‌ها: نتایج حاصل از انجام پژوهش حاکی از آن است که جریان‌های پلاریزه اسپینی در حضور گرادیان دما خلق می‌شود. همچنین با اعمال میدان‌های مغناطیسی و الکتریکی خارجی، بهترین محدوده میدان برای بیشترین شارش جریان اسپینی مشخص شد.

نتیجه‌گیری: با مشخص شدن محدوده مناسبی از میدان‌های خارجی در حضور گرادیان دما، که در آن به سیستم بیولوژیک آسیب وارد نمی‌شود، می‌توان بیان کرد که انتقال امن اطلاعات در این محیط‌ها را شاهد هستیم.

واژه‌های کلیدی: اسپین کالریترونیک، DNA، گرادیان دما، پلاریزاسیون اسپینی، لیزر

۱. دانشیار فیزیک، گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران
۲. دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران
۳. دکترای فیزیک، گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران
۴. مربی، مهندسی اپتیک و لیزر، گروه مهندسی برق، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران

نویسنده مسئول: سهراب بهنیا. تلفن: ۰۹۱۴۱۴۶۸۵۱۵
پست الکترونیک: s.behnia@sci.uut.ac.ir

مقدمه

DNA جهت ایجاد گرادیان دمایی مورد استفاده قرار می‌گیرد [۱۵]. در بخش اول با در نظر گرفتن مدل PBH تصحیح یافته نسبت به درجه آزادی اسپین، به توصیف این مدل پرداخته شد و همچنین معادلات مربوط به برهمکنش اسپین-مدار و معادلات مربوط به میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی خارجی توصیف شد. در ادامه هامیلتونی مدل نوشته شده و معادلات حرکت سیستم استخراج شده‌اند. ما تمام معادلات حرکت را به معادلات دیفرانسیل مرتبه اول تبدیل کرده و با استفاده از روش‌های رهیافت آشوب به تحلیل سیستم پرداخته‌ایم. در بخش دوم سعی شد به بررسی ترابرد اسپینی مولکول DNA در حضور گرادیان دما و عوامل خارجی دیگر از جمله میدان الکتریکی و مغناطیسی پرداخته شود و محدوده مناسب برای عوامل خارجی مؤثر بر گزینش اسپین از داخل مولکول DNA به دست آورده شود.

مدل سازی انتقال اسپین

مدل‌های متفاوتی در سال‌های متمادی برای مطالعه ساختار DNA و بررسی خواص الکتریکی آن ارائه شده است. در سال ۱۹۹۳ پیارد، بیشاپ و داکسیوس مدل یک بعدی PB [۱۶] مربوط به دینامیک غیر خطی ذوب DNA را با جمله غیر خطی اندرکنش بازها در یک رشته تصحیح کردند و مدل PBD را ارائه نمودند. مدل PBH که اندرکنش متقابل بار الکتریکی و نوسانات شبکه DNA را در بر می‌گیرد، می‌تواند برای توصیف مکانیسم انتقال بار و اسپین در DNA به کار برده شود [۹]. مدل PBH علاوه بر اندرکنش بین جفت بازها در DNA، ساختار پیوند هیدروژنی را نیز در مطالعات وارد می‌کند. در اینجا، ما از مدل PBH برای توصیف ترابرد اسپین از DNA استفاده می‌کنیم. در این مدل جفت‌شدگی بار با درجه آزادی کشش بازها در راستای پیوند هیدروژنی در نظر گرفته می‌شود. این مدل، مارپیچ دوگانه DNA را به یک شبکه یک بعدی می‌نگارد. هامیلتونین مدل PBH را می‌توان به حالت نیمه کلاسیک نوشت [۱۷]، در نتیجه هامیلتونین کلی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = H_{PBH} + H_{so} + H_{fields} \quad (1)$$

که در آن H_{PBH} هامیلتونی مربوط به مدل PBH به انضمام اسپین، H_{so} هامیلتونین مربوط به برهمکنش اسپین-مدار و H_{fields} هامیلتونی میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی خارجی می‌باشد. هامیلتونی H_{PBH} نیز شامل جملات زیر است [۹]:

$$H_{lat} = \sum_n \frac{1}{2} m \dot{y}_n^2 + V(y_n) + W(y_n, y_{n+1}) \quad (2)$$

که $V(y_n) = D_n (e^{a_n y_n} - 1)$ پتانسیل مورس می‌باشد که به فرم $V(y_n)$ است. انرژی توده‌ای بین جفت بازهای مجاور هم به صورت زیر معرفی می‌شود [۹]:

$$W(y_n, y_{n+1}) = \frac{k}{2} (1 + \rho e^{-\alpha(y_n + y_{n+1})})(y_{n+1} - y_n)^2 \quad (3)$$

امروزه، نور لیزر به علت دارا بودن خواص منحصربه‌فردش با شدت‌های متفاوت به طور گسترده‌ای در علوم پزشکی و زیستی مورد استفاده قرار می‌گیرد [۱]. به هنگام پرتو دهی نور لیزر بر بافت بیولوژیک، سازوکارهای متفاوتی نظیر برهمکنش گرمایی روی می‌دهد [۲]. برهمکنش گرمایی به کلیه آثاری اطلاق می‌شود که افزایش دمای موضعی پارامترهای متغیر در آن باشد. این آثار گرمایی می‌توانند به وسیله لیزرهای پالسی یا موج پیوسته ایجاد شوند [۳]. اسپین کالریترونیک تأثیر گرادیان دما در دینامیک اسپین را مطالعه می‌کند [۴]. بعد از فرمول بندی مکانیک کوانتوم گشتاور ذاتی ذرات بنیادی یا اسپین مطرح شد که اسپین دارای دو حالت بالا و پایین می‌باشد. اسپین الکترون یک درجه آزادی داخلی است که در سال ۱۹۹۲ توسط آزمایش اشترن-گرلاخ اثبات شد [۵]. اثرات مختلفی منجر به پدیده اسپین کالریترونیک می‌شوند که از آن جمله می‌توان اثر هال اسپین، اثر هال اسپینی معکوس، اثر هال غیر عادی، اثر سی‌بک اسپین و اثر هال کوانتومی را نام برد [۶]. افزایش امنیت و سرعت انتقال اطلاعات یکی از عمده ترین چالش‌ها در نظریه اطلاعات می‌باشد. در پدیده اسپینترونیک که علم ترکیب اسپین الکترون با الکترونیک می‌باشد، از اسپین الکترون به جای بار الکترون به عنوان حامل اطلاعات استفاده شده است [۷]. در اصل هدف اسپینترونیک، استفاده از درجه آزادی اسپین الکترون برای خلق نوع جدیدی از ابزارهای منطقی برای ذخیره اطلاعات می‌باشد [۸]. در پدیده اسپینترونیک آلی از DNA به عنوان مولکولی آلی استفاده شده است [۹]. در این مقاله از دی‌اکسی‌ریبونوکلئیک‌اسید (DNA) به عنوان یک بیومولکول با قابلیت سازگاری با سیستم‌های بیولوژیک و به عنوان گزینه‌ای مناسب برای مطالعه پدیده اسپین کالریترونیک استفاده شده است [۱۰]. مولکول DNA از یک مارپیچ دورشته‌ای تشکیل شده است که هر رشته شامل یک مجموعه پلیمری از نوکلئوتیدها است و هر نوکلئوتید از سه قسمت قند، بازهای آلی و گروه فسفات تشکیل شده است [۱۱]. مارپیچ دوگانه DNA در سال ۱۹۵۳ توسط واتسون-کریک به وسیله تصاویر کریستالوگراف کشف شد و بعد از آن با کشف رسانایی الکتریکی در طول زنجیره DNA، دینامیک ساختاری و اندرکنش آن با محیط به موضوع مورد علاقه محققان بدل شد [۱۲]. مولکول دورشته‌ای DNA به دلیل ساختار اولیه و ثانویه آن یک مولکول کایرال می‌باشد. مولکول کایرال به مولکولی اطلاق می‌شود که دارای عدم تقارن آینه‌ای است [۱۳]. فتوالکترون‌هایی که از یک سطح پوشیده شده با یک لایه مولکول دو رشته‌ای DNA خارج می‌شوند، مستقل از نوع قطبش نور تابیده شده، قطبیده هستند. با اندازه گیری اسپین الکترون‌های عبور کرده با قطبش سنج مات، قطبش اسپینی بالای ۶۰ درصد در دمای اتاق مشاهده شده است. این مشاهدات زمینه ساز استفاده از دو رشته DNA یا هر مولکول کایرال دیگر را به عنوان یک فیلتر اسپینی فراهم می‌کند [۱۴]. در این پژوهش از لیزر مادون قرمز به عنوان یک منبع گرمایی نقطه‌ای برای

صورت زیر بیان می‌شوند [۹]:

$$H_{fields} = H_E + H_B \quad (7)$$

در معادله فوق H_E و H_B به ترتیب هاملتونی مربوط به میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی هستند که به صورت زیر تعریف می‌شوند [۹]:

$$H_E = -e \sum_{n,\sigma} E d \cos[(n-1)\Delta\phi] C_n^{\sigma\dagger} C_n^{\sigma} \quad (8)$$

$$H_B = \sum_n (-\mu_B B C_n^{\uparrow\dagger} C_n^{\uparrow} + \mu_B B C_n^{\downarrow\dagger} C_n^{\downarrow}) \quad (9)$$

در مطالعه کنونی، بیشتر جملات هاملتونی غیر خطی هستند و به شرایط اولیه حساسیت بالایی دارند. از طرفی تحلیل سری زمانی حاصل از معادلات تحول DNA نشان می‌دهد که تحول فضایی این مولکول همانند تحول سیستم‌های آشوبناک است. معادلات حاکم بر قسمت الکترونیکی با استفاده از رابطه هایزنبرگ که به صورت زیر تعریف می‌شود، استخراج می‌شوند [۹]:

$$\dot{C}_n^{\sigma} = -\frac{i}{\hbar} [C_n^{\sigma}, H] \quad (10)$$

که در آن $\sigma = \uparrow, \downarrow$ می‌باشد. برای استفاده از نظریه آشوب، کافی است معادلات درجه اول داشته باشیم، بدین ترتیب معادلات دیفرانسیل مرتبه دوم را به مرتبه اول تبدیل می‌کنیم.

بحث و بررسی

برای مطالعه انتقال اطلاعات با جریان خالص اسپینی باید جریان‌های الکتریکی متناظر با اسپین بالا و پایین را به دست آوریم. جریان‌ها می‌توانند از معادلات حرکت و یا معادله پیوستگی بار-جریان استخراج شوند [۱۲]، به طوری که $I_i^{\sigma} - I_{i-1}^{\sigma} = e \frac{dn_i^{\sigma}}{dt}$ و در آن I_i^{σ} عملگر جریان موضعی متناظر با اسپین σ و $n_i^{\sigma} = C_i^{\sigma\dagger} C_i^{\sigma}$ می‌باشد. در نتیجه عملگرهای کل جریان الکتریکی پایای سیستم به فرم $I^{\sigma} = \sum_{i,\sigma} I_i^{\sigma}$ به صورت زیر بیان می‌شوند [۹]:

$$I^{\uparrow}(t) = \frac{-ie}{\hbar} \sum_n \{W_{n,n+1} C_n^{\uparrow\dagger} C_{n+1}^{\uparrow} + W_{n-1,n}^* C_{n-1}^{\uparrow\dagger} C_n^{\uparrow} + D_{n,n+1} C_n^{\uparrow\dagger} C_{n+1}^{\downarrow} - D_{n-1,n} C_{n-1}^{\uparrow\dagger} C_n^{\downarrow}\} \quad (11)$$

$$I^{\downarrow}(t) = \frac{-ie}{\hbar} \sum_n \{W_{n,n+1}^* C_n^{\downarrow\dagger} C_{n+1}^{\downarrow} + W_{n-1,n} C_{n-1}^{\downarrow\dagger} C_n^{\downarrow} - D_{n,n+1}^* C_n^{\downarrow\dagger} C_{n+1}^{\uparrow} + D_{n-1,n}^* C_{n-1}^{\downarrow\dagger} C_n^{\uparrow}\} \quad (12)$$

با استفاده از معادله جریان، سعی در بررسی تأثیر فاکتورهای متفاوتی از جمله میدان الکتریکی و مغناطیسی خارجی و گرادیان دما بر روی شار جریان اسپینی از داخل DNA را داریم. با تعریف جریان بار خالص CI و

هاملتونی حامل‌های بار الکتریکی در تقریب نزدیک‌ترین همسایگی به انضمام اسپین به صورت زیر بیان می‌شود [۹]:

$$H_{Car} = \sum_n [\epsilon C_n^{\dagger} C_n - V_{n,n+1} (C_n^{\dagger} C_{n+1} + C_{n+1}^{\dagger} C_n)] \quad (4)$$

که در آن $C_n^{\dagger}$ و C_n عملگرهای نابودی و خلق الکترون در سایت n -ام هستند. ϵ انرژی الکترون در سایت‌ها و $V_{n,n+1}$ انرژی جهش الکترون بین نزدیک‌ترین همسایگی می‌باشد. برهم کنش الکترون-شبکه هم به صورت زیر بیان می‌شود [۹]:

$$H_{int} = x \sum_n y_n C_n^{\dagger} C_n \quad (5)$$

به طوری که χ ثابت جفت‌شدگی الکترون-شبکه گونه می‌باشد. عبارت مربوط به اندرکنش اسپین-مدار هم به صورت زیر بیان می‌شود [۱۵]:

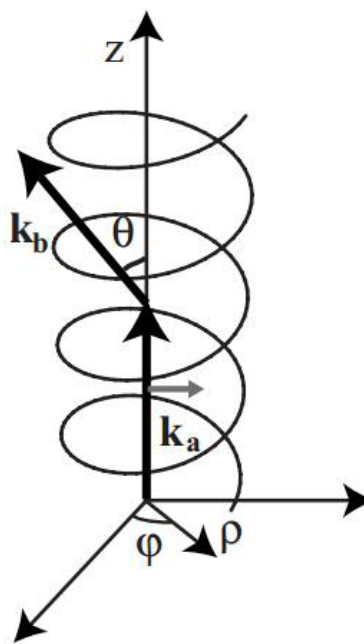
$$H_{SO} = \sum_n [2it_{so} \cos \theta (C_n^{\uparrow\dagger} C_{n+1}^{\downarrow} - C_n^{\downarrow\dagger} C_{n+1}^{\uparrow} - C_n^{\uparrow\dagger} C_{n-1}^{\downarrow} + C_n^{\downarrow\dagger} C_{n-1}^{\uparrow}) + D_{n,n+1} C_n^{\uparrow\dagger} C_{n+1}^{\downarrow} - D_{n,n+1}^* C_n^{\downarrow\dagger} C_{n+1}^{\uparrow} + D_{n-1,n}^* C_{n-1}^{\uparrow\dagger} C_n^{\downarrow} - D_{n-1,n} C_{n-1}^{\downarrow\dagger} C_n^{\uparrow}] \quad (6)$$

به طوری که رابطه زیر برقرار است:

$$D_{n,n+1} = it_{so} \sin \theta [\sin[n\Delta\phi] + \sin[(n+1)\Delta\phi] + i \cos[n\Delta\phi] + i \cos[(n+1)\Delta\phi]]$$

t_{so} همان ثابت برهمکنش اسپین-مدار و θ زاویه پیچ مارپیچ می‌باشد. $\phi = n\Delta\phi$ زاویه در مختصات استوانه‌ای است (شکل ۱).

H_{fields} مربوط به میدان الکتریکی و مغناطیسی خارجی می‌باشد که به



شکل ۱: تصویر شماتیک مارپیچ DNA

و جریان اسپینی خالص sI به صورت زیر تعریف می شوند [۹]:

$$I_c = I^{\uparrow} + I^{\downarrow} \quad (۱۳)$$

$$I_s = I^{\uparrow} - I^{\downarrow}$$

جریان وابسته به اسپین را در DNA بررسی کردیم و همچنین کمیت دیگری را برای مقایسه جریان خالص اسپینی و جریان خالص بار تعریف می کنیم.

به منظور خلق جریان های اسپینی، گرادیان دما و میدان الکتریکی و مغناطیسی خارجی به سیستم اعمال شدند. در ابتدا، سعی شد که خاصیت فیلترینگ اسپینی در حضور گرادیان دما به اثبات برسد و در ادامه با اعمال میدان مغناطیسی و الکتریکی خارجی سعی در خلق جریان اسپینی خالص تری داشتیم.

اثر گرادیان دما

شکل ۲، سری زمانی جریان اسپین در گرادیان دمایی ۳۰ درجه کلوین را نشان می دهد. واضح است که اسپین بالا و پایین باتوجه به گرادیان دما رفتار جداگانه ای را نشان می دهند. این نتیجه بیانگر خاصیت فیلترینگ اسپین توسط DNA می باشد.

اثر میدان الکتریکی

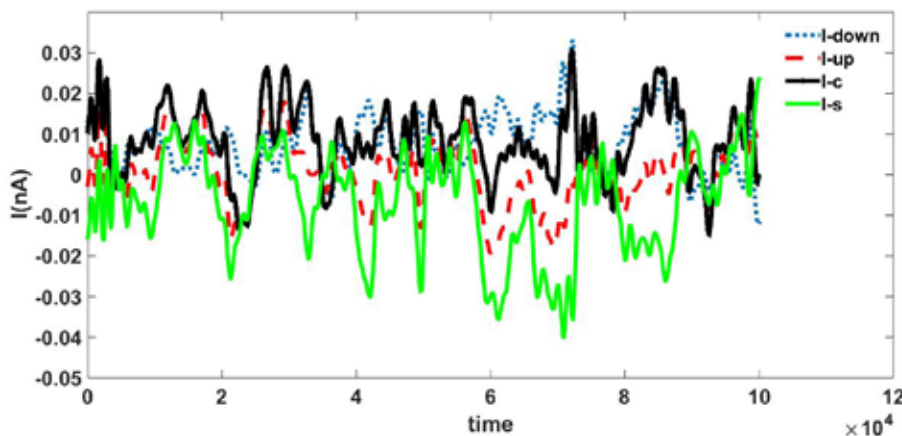
در کنار نتیجه فوق، گیت ولتاژ هم بر انتقال اسپین از داخل مولکول DNA تأثیر می گذارد. ما سعی در بررسی تونل زنی اسپین های گزینش شده از داخل DNA در حضور میدان الکتریکی خارجی داریم. در شکل ۳، نشان داده شده است که میدان الکتریکی قادر به تولید جریان های پلاریزه است. شکل ۳ بیانگر این است که در $E=0.004$ و $E=0.006$ و $E=0.008$ شاهد گزینش مناسب اسپین هستیم.

اثر میدان مغناطیسی

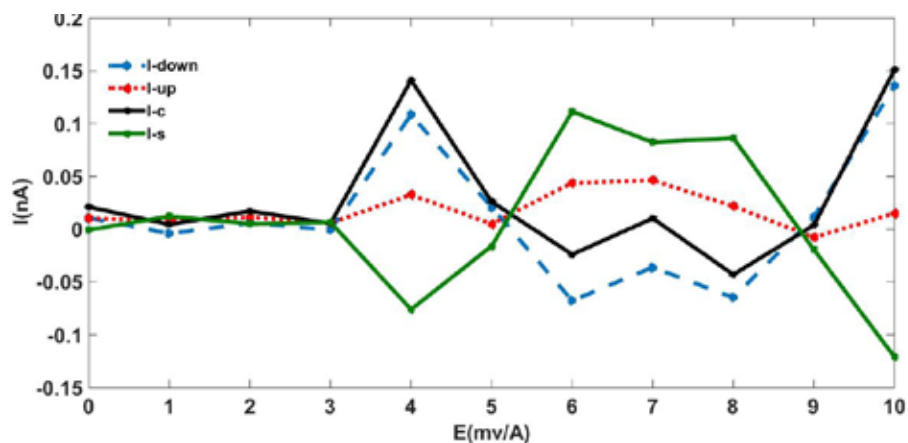
از سوی دیگر، میدان مغناطیسی اثر بالقوه ای در انتقال بارهایی با اسپین های پلاریزه از داخل DNA دارد [۱۹]. در مطالعه حاضر، ما اثر میدان مغناطیسی را بر جریان های اسپینی در DNA در حضور گرادیان دما بررسی می کنیم. شکل ۴ نشان می دهد که در میدان $B=550$ و $B=350$ شاهد ماکزیمم جریان اسپین می باشیم. بنابراین مطالعه فوق جریان اسپینی وابسته به گرادیان دما را نشان می دهد.

نتیجه گیری

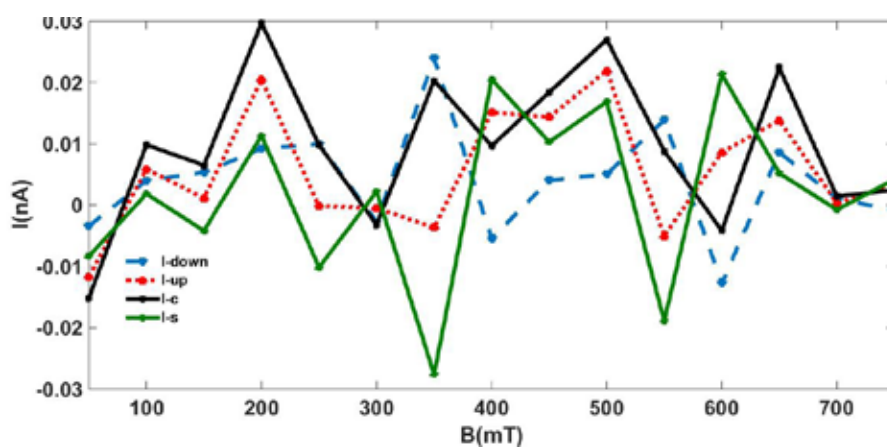
اسپین کالیترونیک یک پدیده نوظهور در مرز بین پدیده انتقال حرارت و فیزیک اسپین می باشد. بیشتر پیشرفت ها در این زمینه بر روی مواد غیر آلی می باشد. الکترونیک آلی جایگاه ویژه ای برای خود در تکنولوژی دستگاه های نانوالکتریک به دست آورده است. در مطالعه فوق، به بررسی تولید جریان های اسپینی با اعمال میدان الکتریکی و مغناطیسی خارجی و اعمال گرادیان دما پرداختیم. در این مطالعه گرادیان دما به دو انتهای زنجیره اعمال می شود و در نتیجه آن می توان خلق جریان پلاریزه اسپینی را مشاهده کرد. با اعمال میدان های خارجی نیز می توان بهترین محدوده از میدان ها را که در آن بیشترین جریان اسپینی شارش پیدا می کند، به دست آورد. این محدوده در حدی است که به محیط بیولوژیکی آسیبی وارد نکند و در نتیجه برای انتقال اطلاعات امن در این محیط ها به کار برده شود.



شکل ۲: سری زمانی جریان در $AT = 30$ کلوین



شکل ۳: جریان اسپینی بر مبنای میدان الکتریکی



شکل ۴: جریان اسپینی بر مبنای میدان مغناطیسی

References:

1. Teixeira GR, Marciano RS, Silva Sergio LP, Polignano GAC, Guimaraes OR, Geller M, Paoli F, Fonseca AS. Infrared laser effects at fluences used for treatment of detain hypersensitivity on DNA repair in *Escherichia coli* and plasmids. *Opt.Laser Technol.* 2014; 64: 46-52.
2. Braun D, Libchaber A. Trapping of DNA by thermophoretic depletion and convection. *Phys. Rev. Lett.* 2002; 89: 188103-1.
3. Keiser G. *Biophotonics: Concepts to Applications*. Boston: Springer; 2016.
4. Yu H, Brechet SD, Ansermet JP. Spin caloritronics, origin and outlook. *Physics Letters A*, 2017; 381: 825-37.
5. Palmer MC, Takahashi. M, Westman HF. WKB analysis of relativistic Stern–Gerlach measurements. *Annals of Physics.* 2013; 505-16.
6. Boona SR, Myers RC, Heremans JP. Spin caloritronics. *Energy & Environmental Science*, 2014; 885-910.
7. Raman KV, Kamerbeek AM, Mukherjee A, Atodiresei N, Sen T, Lazić, P, Blügel S. Interface-engineered templates for molecular spin memory devices. *Nature.* 2013, 509-13.
8. Verdaguer M. Molecular electronics emerges from molecular magnetism. *Science.* 1996; 698.
9. Behnia S, Fathizadeh S, Akhshani A. DNA Spintronics: Charge and Spin Dynamics in DNA Wires. *The Journal of Physical Chemistry C.* 2016; 2973-83.
10. Blackburn GM, Gait MJ, Loakes D, Williams DM. *Nucleic acids in chemistry and biology*. Royal Society of Chemistry, Oxford, UK. 2006.
11. Brown TA, Brown T. *Gene cloning and DNA analysis: an introduction*. John Wiley son. 2016.
12. Watson JD, Crick FH. Molecular structure of nucleic acids. *Nature*, 1953; 171: 737-8.
13. Naaman R, Waldeck DH. Spintronics and chirality: spin selectivity in electron transport through chiral molecules. *Annual review of physical chemistry.* 2015; 66: 263-81.
14. Göhler B, Hamelbeck V, Markus TZ, Kettner M, Hanne GF, Vager Z, Zacharias H. Spin selectivity in electron transmission through self-assembled monolayers of double-stranded DNA. *Science.* 2011; 331: 894-7.
15. Ichikawa M, Ichikawa H, Yoshikawa K, and Kimura Y. Extension of a DNA molecule by local heating with laser. *Phys. Rev. Lett.* 2007; 99: 148104.
16. Peyrard M, Bishop AR. Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation. *Physical review letters.* 1989; 62: 2755.
17. Dauxois T, Peyrard M, Bishop A.R. Dynamics and thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation. *Physical Review E.* 1993; 47: 684.
18. Kalosakas G, Aubry S, Tsironis GP. Polaron solutions and normal-mode analysis in the semiclassical Holstein model. *Physical Review B.* 1998; 58: 3094.
19. Rai D, Galperin M. Electrically driven spin currents in DNA. *The Journal of Physical Chemistry C.* 2013; 117: 13730-7.