لیزر در پزشکی ۱٤۰۱/ دوره ۱۹ / شماره (۴) / صفحات ۱۶-۹.



جفتشدگی با فونون در زنجیرههای DNA تحت تابش فوتون: رویکردی برای طراحی یک تراشه حسگر زیستی

سميرا فتحىزاده*٬٬

 ۲. گـروه فیزیـک، دانشـگاه صـنعتی ارومیـه، ارومیه، ایران
 ۲. پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستارهشناسی، دانشگاه تبریز، تبریز، ایران

نویسنده مسئول: سمیرا فتحیزاده

پست الکترونیک: <u>s.fathizadeh@sci.uut.ac.ir</u>

. 44 . 191. . 119

شماره تماس:

| چکیدہ

مقدمه: دانش اسپینترونیک در طول چند دهه گذشته به علت توسعه دستگاههای جدید که می تواند الکترونیک مولکولی را تقویت یا مستقیماً جایگزین کند، توجه دانشمندان بسیاری را به خود جلب کرده است. اسپینترونیک رابطه متقابل بین جریانهای اسپینی و خواص مغناطیسی مواد مختلف را مورد مطالعه قرار می دهد. تحقیقات گسترده دانشمندان در طول چند دهه اخیر بر روی مولکول زیستی DNA باعث شده است که این مولکول به عنوان یک نانو ساختار پیچیده با قابلیت انعطاف پذیری بالا در اسپینترونیک، صنعت نانو و پزشکی مورد استفاده بسیاری قرار گیرد.

روش بررسی: در این کار، تاثیر فونون های شبکه و فوتونهای تابشی روی ترابرد اسپینی زنجیره DNA مورد بررسی قرار میگیرد. هامیلتونی غیربرهمکنشی با استفاده از مدل تنگ بست که اثر اسپین در آن در نظرگرفته شده نوشته می شود و سهم اندرکنش الکترون – فوتون با استفاده از مدل هولشتاین اضافه می شود. همچنین جفت شدگی الکترون – فوتون برای درنظر گرفتن اثرات نورتابشی در سیستم ملاحظه می شود. سپس با به دست آوردن معادلات تحول سیستم و محاسبه جریان های اسپینی، ترابرد اسپینی سیستم مطالعه می شود.

یافتهها: نتایج نشان میدهند با افزایش مقدار جفتشدگی الکترون - فوتون تغییرات فاحشی در جریان اسپینی عبوری از سیستم مشاهده می شود. از طرفی، جفتشدگی الکترون - فوتون نیز تاثیر بسزایی روی جریان اسپینی عبوری از سیستم دارد، به طوری که در مقدار جفتشدگی الکترون - فوتون پایین حتی با افزایش انرژی فوتون تغییر چندانی در جریان اسپینی مشاهده نمی شود اما زمانی که جفتشدگی الکترون - فوتون افزایش می بابد انرژی فوتون به عنوان یک فاکتور کلیدی عمل می کند که می تواند جریان اسپینی عبوری را کنترل کند. زمانی که انرژی فوتون به ۱ الکترون - ولت می رسد بیشترین جریان اسپینی از سیستم عبور می کند.

نتیجهگیری: اندرکنش با فونونهای شبکه و تابش نور میتواند از عوامل تاثیرگذار بر ترابرد اسپین در سیستمهای زیستی باشد. میتوان گفت با تنظیم انرژی فوتون تابشی و تغییر جفتشدگی میتوان جریان اسپینی را کنترل کرد که در طراحی ابزارهای اپتوالکتریکی کاربرد دارد. ابزارهای اپتوالکتریکی، یکی از اجزای اصلی حسگرهای زیستی هستند که در تشخیص بیماریها و علل آنها نقش بسزایی دارند.

واژەھاي كليدى: اسپينترونيك، اپتوالكترونيك، دىاناي، جفتشدگى الكترون - فوتون، جفتشدگى الكترون - فوتون

مقدمه

مواد زیستی در سالهای اخیر توجه دانشمندان زیادی را به خود جلب کرده است. محققان بسیاری ریزساختارها و عملکرد آنها را مورد مطالعه قرار دادهاند. این مواد به دلیل سازگاری با طبیعت، تهیه آسان و غیرسمی بودن، دوست دار محیط زیست درنظر گرفته می شوند [۱]. در این میان، ساختارهای مارپیچ بهدلیل انعطاف پذیری بالا در صنعت و پزشکی مورد استفاده بسیاری قرار مىگيرند. مواد زيستى ازجمله اسيددئوكسى ريبونوكلئيك (DNA) بهعنوان یک نانو ساختار مارپیچ شناخته میشود. این مولکول دورشتهای بهدلیل ساختار اولیه و ثانویهاش یک مولکول کایرال میباشد. مولکول کایرال به مولکولی اطلاق میشود که دارای عدمتقارن آینهای است و همچنین می تواند خاصیت رسانایی، نارسانایی، نیمهرسانایی و ابررسانایی را از خود نشان دهد. از طرفی مولکولهای آلیکایرال، کاندیدای مناسبی برای انتقال اطلاعات کدگذاریشده در اسپین و منبع جریان قطبیده اسپینی میباشند [۲]. در سال ۲۰۱۱، دانشمندان کشف کردند که انتقال الكترون ازطريق مولكولهاي كايرال به جهت اسپين الكترون بستكي دارد و اخيراً نشان داده شده است كه جابجائي بار در مولکولهای کایرال، قطبیشدن گذار اسپین را ایجاد میکند. از اسپین الکترون میتوان برای رمزگذاری و ذخیرهسازی و انتقال اطلاعات استفاده كرد. علاوهبر موارد فوق، مطالعات بر روى خواص انتخابی اسپین از مولکول های دورشتهای کایرال DNA، اثر گزینش اسپین توسط مولکولهای کایرال را به نمایش گذاشته شده است. اتصال اسپین و انتقال اسپین در مواد زیستی، افق موضوع را گستردهتر کرده است. سیستمهای اسپینترونیک از جريان الكتروني كه از حامل هاي اسپين بالا و اسپين پايين تشكيل شده است، استفاده می کنند. این حامل ها، اطلاعات ر مزگذاری شده در حالت اسپین خود را منتقل میکنند. جریانهای مختلف مربوط به اسپین بالا و اسپین پایین میتواند از طریق DNA جریان یابد. اثرات خارجي مانند ميدان الكتريكي و مغناطيسي، دما و تغييرات توالی در قطبش اسپین نقش بسزایی دارند. حساسیت ترابرد الكترون به نوسانات شبكه را ميتوان در جفت شدكي الكترون -فوتون ملاحظه كرد. اثر جفتشدگي الكترون - فوتون براي فرايند ترابرد الکترون در DNA در یک مدل بدون درنظر گرفتن اسپین

الکترون بررسی شده است [۳]. در این کار، ما اثر جفت شدگی الکترون – فوتون را در کنار اثرات اسپین الکترون مطالعه میکنیم. جفت شدگی بین درجات آزادی الکترونی و ارتعاشی با یک فاکتور جفت شدگی توضیح داده می شود. در ترابرد الکتریکی DNA، این جفت شدگی در مضمون پلارون بیان می شود [۴]، به طوری که الکترون ها با اعوجاجات شبکه یک حالت مقید را تشکیل می دهند و می توانند با انتقال و تشکیل اعوجاج دیگر در طول شبکه حرکت کنند. چنین اعوجاجاتی با کشیده شدن و چرخیدن پیوند هیدروژنی در DNA همراه است و شامل مدهای اپتیکی (نوسانات پایه) در مولکول می شود.

ازطرفدیگر، اندرکنش سیستمهای زیستی با نور و طراحی ابزارهای اپتوالکتریکی برمبنای این مولکول ها توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است. در سالهای اخیر، ابزارهای اپتوالکتریکی مثل سوئیچهای اپتیکی برمبنای مولکولهای بیولوژیکی بهدلیل نقش مهمی که به عنوان یک عنصر حیاتی در طراحی مدرن مدارهای منطقی و حافظه در حسگرهای زیستی دارند، بسیار مورد توجه قرار گرفته اند [۵]. در سال ۲۰۰۹، یک سوئیچ نوری مولکولی نور محور بر اساس توالی DNA پیشنهاد شد [۶]. به همین ترتیب، گزارش های متعددی در مورد مطالعات مختلف روی سوئیچهای مولکولی تاکنون وجود دارد. در سال ۲۰۱۹، وانگ و همکاران یک سوئیچ مولکولی کایرال محوری مبتنیبر نور مرئی را در یک ساختار مارپیچ نشان دادند [٧]. خواص نوری یک سیستم زیستی میتواند بر کاربردهای تشخیصی و درمانی نور روی این سیستمها نیز تأثیر بگذارد. برهمکنش نور میتواند عملگرهای مولکولی تنظيمشده با نور ايجاد كند [٨]. همچنين، انتقال بار الكتريكي با محرک نور می تواند خواص هدایت سیستم را تنظیم کند. انتقال بار ناشی از فوتون همچنین میتواند برای طراحی یک نانوماشین مبتنی بر مولکول استفاده شود [۹]. در این حالت برای حرکت نانوماشین نیازی به سوختهای مولکولی دیگر نیست. نانو ماشینها می توانند برای انتقال دارو در یک سیستم زنده مورد استفاده قرار گیرند. توانایی تنظیم جریان الکتریکی یک دستگاه الکترونیکی تحت تابش نور برای کاربردهای عملی الکترونیک در مقیاس نانو بسیار مهم است. در دستگاههای اپتوالکترونیک مولکولی، کنترل جریان الکترون یک چالش بزرگ است. با این

توصیف میتوان گفت بررسی اندرکنش الکترون – فوتون نیز میتواند مباحث جدیدی را در سیستمهای مولکولی باز کند. بنابراین، هدف از انجام این کار، بررسی اندرکنش الکترون – فوتون و الکترون – فوتون روی ترابرد اسپینی یک مولکول کایرال برای طراحی و ساخت ابزارهای اپتوالکتریکی در ابعاد نانو برمینای مولکولهای زیستی و برای کاربرد در نانوحسگرهای زیستی پزشکی می باشد.

مدل وروشها

در این کار، برای بررسی اثرات تابش نور از تابش نور لیزر استفاده میکنیم. سازوکارهای متفاوتی نظیر برهمکنش گرمایی به هنگام پرتودهی نور لیزر بر بافت بیولوژیک، روی میدهد [۱۰]. برهمكنش گرمايي ازجمله واكنش هايي است كه هنگام تابش ليزر بر روی سیستم های زیستی ایجاد میشود و کاربرد بسزایی در لیزر پزشکی بهویژه در جراحی لیزری دارد. ازطرفی نور لیزر دارای خواص منحصربهفردی مانند تکرنگبودن، تکفامبودن و درخشندگی در واحد زاویه فضایی، با شدتهای متفاوت است که بهطور گستردهای در علوم پزشکی و زیستی بکار برده میشود [۱۱]. در این پژوهش، لیزر مادون قرمز به عنوان یک منبع نوری نقطهای، جهت تابش نور روی DNA مورد استفاده قرار میگیرد. ضروری است که برمبنای یک مدل ریاضی نسبت به مطالعه اندرکنش سیستم با فونون های شبکه و فوتون های تابشی اقدام شود. در این مطالعه، مولکول DNA از چپ و راست به الکترودهای فلزی با پتانسیل V_{sd} متصل شده و در یک حمام گرمایی غوطهور شده است. ترابرد الکتریکی وابسته به اسپین در یک زنجیره DNA با N جفت باز مي تواند به صورت زير ملاحظه شود:

به طوری که $H_{SO} = H_{PBH} + H_{SO}$ شامل یک هامیلتونی مدل PBH است که با اثرات اسپینی ترکیب شده و H_{SO} جمله مربوط به اندرکنش اسپین – مدار است [۱۲–۱۴].

در مدل PBH، دینامیک شبکه DNA ازطریق هامیلتونی مدل PBD^۳ بهصورت زیر بیان می شود:

$$H_{PBD} = \sum_{n} \left[\frac{1}{2} m \dot{y}_{n}^{2} + V(y_{n}) + W(y_{n}, y_{n+1}) \right]$$
(2)

¹ Laser Surgery

به طوری که m جرم کاهشیافته نوکلئوتیدها، n تعداد سایت ها، به طوری که m جرم کاهشیافته نوکلئوتیدها، n تعداد سایت ها، y_n جابجایی جفت بازها در امتداد پیوند هیدروژنی، $p_n (e^{-a_n y_n} - 1)^2$ در راستای پیوندهای هیدروژنی و $(y_{n+1} - y_n) = D_n (e^{-a_n y_n} - 1)^2$ هیدروژنی و $(y_{n+1} - y_n)^2 = (1 + \rho e^{-b(y_{n+1} + y_n)})(y_{n+1} - y_n)^2$ $(y_{n+1} - y_n)^2 = (1 + \rho e^{-b(y_{n+1} + y_n)})(y_{n+1} - y_n)^2$ $(y_{n+1} - y_n)^2 = (1 + \rho e^{-b(y_{n+1} + y_n)})(y_{n+1} - y_n)^2$ $(y_{n+1} - y_n)^2 = (1 + \rho e^{-b(y_{n+1} + y_n)})(y_{n+1} - y_n)^2$ $(y_{n+1} - y_n)^2 = (1 + \rho e^{-b(y_{n+1} + y_n)})(y_{n+1} - y_n)^2$ $(y_{n+1} - y_n)^2 = (1 + \rho e^{-b(y_{n+1} + y_n)})(y_{n+1} - y_n)^2$ $(y_{n+1} - y_n)^2 = (1 + \rho e^{-b(y_{n+1} + y_n)})(y_{n+1} - y_n)^2$ $(y_{n+1} - y_n)^2 = (1 + \rho e^{-b(y_{n+1} + y_n)})(y_{n+1} - y_n)^2$ $(y_{n+1} - y_n)^2 = (1 + \rho e^{-b(y_{n+1} + y_n)})(y_{n+1} - y_n)^2$ $(y_{n+1} - y_n)^2 = (1 + \rho e^{-b(y_{n+1} + y_n)})(y_{n+1} - y_n)^2$ $(y_{n+1} - y_n)^2 = (1 + \rho e^{-b(y_{n+1} + y_n)})(y_{n+1} - y_n)^2$ $(y_{n+1} - y_n)^2 = (1 + \rho e^{-b(y_{n+1} + y_n)})(y_{n+1} - y_n)^2$

که جمله اول، انتقال الکترون و جمله دوم، اندرکنش الکترون با شبکه DNA را نشان می دهد. $C_n^{\sigma}(c_n^{\sigma})$ عملگر خلق (فنا) یک الکترون با اسپین $\downarrow = \sigma$ ، $\sigma = f_n$ عملگر خلق (فنا) یک باز n-ام و $t_{n,n+1}$ ثابت پرش الکترون بین جفت بازهای مجاور را نشان می دهد. انرژی های در سایت و ثابت های پرش الکترون بین جفت بازهای DNA در جدول ۱ نشان داده شدهاند [۱۵]. مقادیر پارامترهای استفاده شده در مدل PBH نیز در جدول ۲ نوشته شدهاند [۱۳]9].

²Peyrard–Bishop–Holstein

³ Peyrard–Bishop–Dauxois

۱۲ | فصلنامه لیزر در پزشکی / دوره نوزدهم / شماره (٤)

مدرك تحصيلي	پارامتر
-4/9 eV	${\cal E}_{A-T}$
-۴/۵ eV	\mathcal{E}_{C-G}
-r ۹ meV	$t_{TT} \cdot t_{AA}$
۰ ⁄۵ meV	t_{AT}
۳ meV	$t_{CT} \cdot t_{AG}$
۲ meV	t_{TA}
w meV	$t_{CA} \cdot t_{TG}$
-\ meV	$t_{TC} \cdot t_{GA}$
۲۰meV	t_{CC} , t_{GG}
-\• meV	t _{GC}
-∧ meV	t _{cG}

جدول ۱: انرژیهای در سایت برای جفت بازهای مختلف و ثابت های یرش بین جفت بازهای مجاور [۱٥]

زمانی که یک بار الکتریکی با تکانه p از مارپیچ DNA عبور میکند، به دلیل میدان الکتریکی سیستم مارپیچ، یک میدان مغناطیسی در چارچوب بار الکتریکی سیاکن ایجاد می شود که منجر به اندرکنش اسپین – مدار (SOC) می گردد. هامیلتونی منجر به اندرکنش اسپین – مدار (SOC) می گردد. هامیلتونی SOC به صورت $(\tilde{f} \times \tilde{p})$. $\hat{\sigma} = -\frac{\alpha}{\hbar} \hat{\sigma}.(\hat{r} \times \tilde{p})$ ارائه می شود [۱۰]. SOC به صورت $(\tilde{f} \times \tilde{p}).\hat{\sigma} = -\frac{\alpha}{\hbar}$ ارائه می شود [۱۰]. SOC به صورت $(\tilde{f} \times \tilde{p}).\hat{\sigma} = -\frac{\alpha}{\hbar} \hat{\sigma}.(\hat{r} \times \tilde{p})$ می گردد. هامیلتونی میدان الکتریکی شعاعی F_r معرفی می باشد. \hat{r} مولفه شعاعی میدان الکتریکی شعاعی F_r معرفی می باشد. اندرکنش اسپین – مدار در مختصات استوانه ای، $(f_r, \sigma_r, \sigma_r, \sigma_z) = \hat{\sigma}$ ماتریس های پاولی، و \tilde{f} عملگر تکانه خطی می باشد. اندرکنش اسپین – مدار پاولی، و $(f_r + f_r) = -f_r + f_r +$

(4) کە:

 $D_{n,n+1} = it_{SO} \sin \theta [\sin(n\Delta\phi) + \sin((n+1)\Delta\phi) + i\cos(n\Delta\phi) + i\cos((n+1)\Delta\phi)]$ و $D_{n,n-1} = D_{n-1,n}^*$ همچنین، $t_{SO} = 0.11 \ eV$ مقدار ثابت اندرکنش اسپین – مدار، $\theta = 0.66 \ rad$ زاویه مارپیچ و $\Delta \phi = \frac{\pi}{5}$

جفتشدگی با فونون در زنجیرههای DNA تحت تابش فوتون: رویکردی برای طراحی یک تراشه حسگر زیستی

مدرك تحصيلي	پارامتر
۳۰۰ amu	т
8/9 A	$a_{\scriptscriptstyle AT}$
۴⁄۲ A	a_{GC}
۰٬۰۵ eV	$D_{_{AT}}$
۰٬۰۷۵ eV	D_{GC}
$\cdot \cdot \cdot \cdot \cdot eV / A^{0^2}$	k
۰٫۵	b
• A	ρ
[•_/۶-•_/\]eV	χ

جدول ۲: مقادیر پارامترهای DNA مورد استفاده در مدل PBH [۱۳و۳]

ازطریق DNA اختلاف پتانسیل الکتریکی V_{sd} بین دو انتهای DNA ازطریق الکترودهای فلزی در دو انتهای سیستم توسط هامیلتونی زیر اعمال میشود: $H_{Lead} + H_{DNA-Lead} = \sum_{k} \sum_{\sigma} \{(\varepsilon_{L_{k}} + eV_{sd}/2)a_{L_{k}}^{\sigma+}a_{L_{k}}^{\sigma} + (\varepsilon_{R_{k}} - eV_{sd}/2)a_{R_{k}}^{\sigma+}a_{R_{k}}^{\sigma} + (t_{L}a_{L-k}^{\sigma+}c_{L}^{\sigma} + t_{R}a_{R_{k}}^{\sigma+}c_{N}^{\sigma} + H.c.)\}$

(5)

بهطوری که $a_{\beta_k}^{\sigma}(a_{\beta_k}^{\sigma})$ عملگر خلق (فنا) یک اسپینور در سایت بهطوری که $a_{\beta_k}^{\sigma}(a_{\beta_k}^{\sigma})$ عملگر خلق (فنا) یک اسپینور در سایت k از الکترود $\beta = L, R$ ، $\beta = 0.42 \ eV$ ، انرژی پرش الکترون بین الکترودها و DNA می باشد. اثرات پراکندگی فونون روی سرعت، انرژی و چگالی الکترونها منجر می شود که اندرکنش الکترون – فوتون را روی هامیلتونی سیستم در نظر بگیریم. در حضور اندرکنش های الکترون – فوتون و الکترون – فوتون، انرژی های در سایت الکترون و انرژی پرش الکترون بین سایتهای مجاور به صورت زیر تغییر خواهد کرد [۱۰و۷]:

$$\varepsilon_n' = \varepsilon_n - \frac{g^2}{\omega_{phonon}} + \frac{|M|^2}{\omega_{phonon}}^2 \quad , \qquad t_{n,n+1}' = t_{n,n+1} \exp\left[-\frac{g^2}{(\omega_{phohon})^2}\right]$$
(19)

که M وg ، بترتیب ثابت جفتشدگی الکترون – فوتون و الکترون – فوتون هستند. برای توصیف رفتار دینامیکی سیستم، معادلات تحول قسمت کلاسیک را با استفاده از معادله هامیلتون – ژاکوبی و قسمت کوانتومی را با استفاده از معادله هایزنبرگ ([c_n, H_{tot}]) بهدست می آوریم. هدف از این مطالعه، بررسی اثر جفتشدگی

DNA الکترون – فوتون و الکترون – فوتون روی ترابرد اسپینی DNA میباشد. بنابراین، سعی میکنیم جریانهای متناظر با اسپینهای بالا و پایین را محاسبه کنیم. جریان الکتریکی موضعی از معادله پیوستگی جریان – بار بهصورت $\frac{dn_n^{\sigma}}{dt}$ بهدست $n_n^{\sigma} = c_n^{\sigma} - I_{n-1}^{\sigma} = e \frac{dn_n^{\sigma}}{dt}$ بهدست $n_n^{\sigma} = c_n^{\sigma} - I_{n-1}^{\sigma} = e \frac{dn_n^{\sigma}}{dt}$ بهدست $n_n^{\sigma} = c_n^{\sigma} + C_n^{\sigma}$ به اسپین موضعی و I_n^{σ} بهدست $n_n^{\sigma} = c_n^{\sigma+} c_n^{\sigma}$ اسپینی موضعی و I_n^{σ} به اسپینی $I^{\sigma}(t) = \sum_n I_n^{\sigma}$ به اسپینی $I^{\sigma}(t) = \sum_n I_n^{\sigma}$ به میشود: $I^{\uparrow}(t) = \frac{ie}{\hbar} \sum_n [(t'_{n,n+1} + 2it_{so} \cos \theta) c_{n+1}^{\uparrow+} - (t'_{n-1,n} - 2it_{so} \cos \theta) c_{n-1}^{\uparrow+} c_n^{\uparrow}$

$$+D_{n,n+l}c_{n+l}^{\uparrow+}c_{n}^{\downarrow} - D_{n-l,n}c_{n-l}^{\downarrow+}c_{n}^{\uparrow}] + t_{L}\sum_{k} (c_{1}^{\uparrow+}a_{L_{k}}^{\uparrow} - a_{L_{k}}^{\uparrow+}c_{1}^{\uparrow}) - t_{R}\sum_{k} (c_{N}^{\uparrow+}a_{R_{k}}^{\uparrow} - a_{R_{k}}^{\uparrow+}c_{N}^{\uparrow})$$

$$(26)$$

$$I^{\downarrow}(t) = \frac{ie}{t_{k}}\sum_{k} [(t_{n,n+l}' - 2it_{SO}\cos\theta)c_{n+l}^{\downarrow+}c_{n}^{\downarrow} - (t_{n-l,n}' + 2it_{SO}\cos\theta)c_{n-l}^{\downarrow+}c_{n}^{\downarrow}]$$

$$\frac{h}{n} \frac{1}{n} -D_{n,n+1}^{\downarrow} c_{n+1}^{\downarrow} c_{n}^{\uparrow} + D_{n-1,n}^{\ast} c_{n-1}^{\downarrow} c_{n}^{\downarrow}] + t_{L} \sum_{k} (c_{1}^{\downarrow+} a_{t_{k}}^{\downarrow} - a_{t_{k}}^{\downarrow+} c_{1}^{\downarrow}) - t_{R} \sum_{k} (c_{N}^{\downarrow+} a_{k_{k}}^{\downarrow} - a_{k_{k}}^{\downarrow+} c_{N}^{\downarrow})$$
(27)

نت_ايج

بررسی جریانهای وابسته به اسپین در سیستمهای زیستی از اهمیت بالایی برخوردار است. ما در این مطالعه، ایجاد و کنترل جریانهای اسپینی در DNA را در حضور اندرکنش الکترون – فوتون و تابش نور بررسی میکنیم. برای این کار از بخشی از توالی کروموزوم ۲۲ انسان (CH22) با ۶۰ جفت باز استفاده میکنیم. CH22 از ۲۵ یکلنوتید تشکیل شده که ما فقط ۶۰ جفت باز از آن با توالی نوکلنوتید

AGGGCATCGCTAACGAGGGT GCCGTCCACAGCATCGCTAT GCCGTCCACAGCATCGCTAT وازیک CGAGGACACCACACCGTCCA تتخاب کردهایم. با استفاده از یک تحلیل آماری مشخص شده است که توالی CH22 کارایی بیشتری در ترابرد الکتریکی در فاصلههای دورتر دارد. بنابراین از توالی مذکور برای مطالعه ترابرد الکتریکی استفاده میکنیم. برای بررسی ترابرد اسپینی در سیستم، جریان خالص اسپینی طبق رابطه ${}^{\downarrow}I - {}^{\uparrow}I_s$ استخراج می شود و خواص گزینش اسپینی سیستم بررسی می شود.

تاثیر جفتشدگی الکترون - فوتون

در سیستمهای مولکولی، گزینش اسپینی میتواند با اعمال یک ولتاژ انجام شود که بدین معنی است که حالت مغناطیسی بهصورت الکتریکی کنترلپذیر است. در این کار با اعمال ولتاژ



شکل ۱: نمودار جریان خالص اسپینی نسبت به تغییرات ولتاژ اعمالی برای توالی CH22 به ازای مقادیر جفتشدگی الکترون - فوتون مختلف برحسب eV.

شکل ۱ تغییرات جریان خالص اسپینی عبوری از سیستم را نسبت به ولتاژ اعمالی در مقادیر مختلف جفت - شدگی الکترون -فوتون (g) برای توالی CH22 نمایش میدهد. نتیجه نشان میدهد که در مقادیر مختلف ولتاژ، عدم حضور جفتشدگی الکترون - فوتون و جفتشدگی بسیار ناچیز، تاثیر چندانی روی ترابرد اسپینی سیستم ندارد اما زمانی که مقدار جفتشدگی افزایش مییابد، جریان اسپینی عبوری از سیستم تغییر میکند. تاثیر افزایش مقدار جفتشدگی الکترون - فوتون در مقادیر ولتاژ منفی بیشتر نمایان می شود، به طوری که در مقادیر منفی ولتاژ بیشترین تفاوت در جریان اسپینی عبوری از سیستم نسبت به حالتی که

با درنظر گرفتن تابش نور لیزر با انرژی برابر eV ۱/۶ بهازای مقادیر مختلف ولتاژ تابیدهشده و در مقادیر مختلف جفتشدگی الکترون – فوتون، جریان اسپینی عبوری از سیستم مطالعه می شود (شکلهای ۲).

در شکل ۲-الف، تغییرات جریان اسپینی نسبت به تغییرات جفتشدگی الکترون - فوتون در ولتاژهای مختلف و در غیاب جفتشدگی الکترون - فوتون نشان داده شده است. نتایج نشان میدهد تا مقدار V = 3.8 = |M|، جریان اسپینی بهازای ولتاژهای مثبت حول ۸۸ 0+ نوسان میکند که نشان میدهد جریان اسپینی خالص مربوط به اسپینهای بالاست و با معکوس کردن ولتاژ، جریان اسپینی حول ۸۸ 0- نوسان میکند که نشان میدهد جریان اسپینی خالص مربوط به اسپینهای پایین است.

اما با افزایش مقدار جفت شدگی الکترون - فوتون جریان های اسپینی نامنظم شکل می گیرد و دامنه نوسان تا نزدیک ۳۰۰nA افزایش می یابد.

شكل ۲ - ب، تفييرات جريان اسپينی نسبت به تغييرات جفتشدگی الكترون - فوتون بهازای مقدار جفتشدگی الكترون - فوتون g=0.02 را نشان می دهد. در اين شرايط هم، تا مقدار g=0.02 را نشان می دهد. در اين شرايط هم، تا مقدار $M = 1 \ eV$ ، جريان اسپينی تا مقدار N • N تا مقدار N = 3.8 eV ، جريان اسپينی تا مقدار N • N نوسان می كند. در اين شرايط، همچنان به ازای ولتاژهای مثبت، نوسان می كند. در اين شرايط، همچنان به ازای ولتاژهای مثبت، جريان غالب مربوط به اسپينهای بالا و با معكوس كردن ولتاژ، جريان غالب مربوط به اسپينهای پايين می باشد. با افزايش مقدار جنيان غالب مربوط به اسپينهای پايين می باشد. با افزايش مقدار جنيان با دامنه بالا شكل می گيرد.

الف)



شکل ۲: تغییرات جریان خالص اسپینی نسبت به تغییرات جفتشدگی الکترون- فوتون برحسب eV به ازای مقادیر مختلف ولتاژ اعمالی برای توالی CH22 الف) فوتون برحسب eV = g=0.02. ب= 0.9

همان طورکه در شکلهای ۲ مشخص است، جفتشدگی الکترون – فوتون بیشینه ($M_{
m max}$)که در آن بیشترین جریان

جفتشدگی با فونون در زنجیرههای DNA تحت تابش فوتون: رویکردی برای طراحی یک تراشه حسگر زیستی

اسپینی از سیستم عبور میکند، بهازای مقادیر مختلف g، مستقل از مقدار ولتاژ میباشد.

شكل ۳، تغییرات جریان اسپینی را نسبت به تغییر همزمان انرژی فوتون تابشی و مقدار جفتشدگی الكترون – فوتون نشان می دهد. در ولتاژ $V_{sd} = 3 \, v$ نشان می دهد. نتایج نشان می دهد كه در مقدار جفتشدگی پایین، كمترین جریان اسپینی از سیستم عبور می كند حتی اگر انرژی فوتونهای تابشی افزایش یابد. اما، زمانی که مقدار جفتشدگی الكترون – فوتون افزایش می یابد جریان اسپینی عبوری از سیستم نیز افزایش می یابد. زمانی كه انرژی فوتون به $V = 1 = \omega$ می رسد، بیشترین مقدار جریان اسپینی از سیستم شارش پیدا می كند، به طوری كه دامنه جریان به ۲۵۰ م در مقدار جفتشدگی الكترون – فوتون $V = 1.7 \leq M$ سیستم شارش پیدا می كند، به طوری كه دامنه جریان به ۲۵۰ م می رسد. با فزایش انرژی فوتون از این مقدار، مجدداً جریان اسپینی كاهش می یابد. می توان گفت حد آستانه انرژی فوتون برای عبور بیشترین جریان اسپینی مقدار $W = 1 = \omega$ می باشد.



بحث

مطالعات نظری اخیر، تقویت جریانهای اسپینی را بهدلیل پولارونها [۱۹]، همبستگی الکترونی [۲۰] و فونونها [۱۲] گزارش کردهاند. با توجه به دینامیک سیستم، جریانهای اسپینی و گزینش اسپینی ناشی از کایرال بودن یک سیستم، یک پدیده حالت برانگیخته است که توسط نوسانات شدید ناشی از تغییر شرایط محیطی در طول رژیم گذار ایجاد میشود. زمانی که سیستم به یک رژیم پایدار نزدیک میشود، حالتهای پایه قطبیده اسپینی رخ میدهند. بااین حال، این که آیا یک قطبش اسپینی وجود دارد یا خیر، به توانایی چگالی الکترونی و تکانه زاویهای برای حرکت بین

حالتهای حالت پایه بستگی دارد. شایان ذکر است که تحریک نوری یک گروهدهنده در سیستمهای انتقال الکترون می تواند باعث پلاریزاسیون بار شود، همان طورکه اعمال یک میدان الکتریکی به الکترودها می تواند قطبش بار ایجاد کند [۲۲]. در این حالت، دهنده و گیرنده الکترون، یک اختلاف پتانسیل الکتروشیمیایی تجربه می کنند که قابل مقایسه با حالت اعمال میدان الکتریکی است.

در مطالعه حاضر، تاثیر جفتشدگی الکترون - فوتون و الکترون - فوتون روی جریانهای اسپینی عبوری از DNA مطالعه شده است. حالت V = 0 = g، متناظر با رژیم بالستیک بدون اندرکنش الکترون - فوتون می باشد. در مقادیر ولتاژ منفی، با افزایش مقدار جفتشدگی الکترون - فوتون، اندازه جریان عبوری از سیستم کاهش می یابد. نتیجه ای که قبلاً در بررسی اندرکنش الکترون - فوتون برای ساختارهای نقاط کوانتومی گرافن بهدست آمده است [۲۳]. کاهش جریان میتواند به علت پراکندگی ولتاژ در جهت منفی از 0/7 ولت افزایش مییابد، در برخی مقادیر ولتاژ، جریان عبوری از سیستم به ازای مقدار جفتشدگی الکترون - فوتون برابر V = 0.04 = g نسبت به حالت مقادیر ولتاژ، جریان عبوری از سیستم به ازای مقدار جفتشدگی بالستیک افزایش مییابد. این پدیده میتواند مرتبط با گذارهای بین باندهای الکترونی به کمک فونونها باشد که به جای میرایی جریان، موجب تقویت آن میشود [۲۴].

در مطالعه تاثیر جفتشدگی الکترون - فوتون مشخص شده است که جفتشدگی الکترون - فوتون بیشینه (M_{max}) که در آن بیشترین جریان اسپینی از سیستم عبور میکند، به ازای مقادیر مختلف g، مستقل از مقدار ولتاژ اشد. دلیل این است که انرژی الکترونهای دارای اسپین در سیستم ما برابر $\frac{|M|}{\omega_{phonon}} + \frac{g^2}{\omega_{phonon}}$ میباشد که مستقل از ولتاژ بیان می شود [۲۳]. همچنین مطابق نتایج

بهدست آمده، وابستگی بیشترین جریان اسپینی عبوری از سیستم به انرژی فوتونهای تابشی مشاهده می شود که قبلاً هم در بررسی اندرکنش الکترون - فوتون برای نقاط کوانتومی گرافن مشاهده شده است [۲۳].

نتيجەگىرى

اندرکنش با فوتون و تابش نور میتواند از عوامل تاثیرگذار بر ترابرد اسپین در سیستمهای زیستی باشد. ما در این کار، تاثیر اندرکنش الكترون - فوتون و الكترون - فوتون را روى خواص انتقال اسپين DNA بهصورت تئوری بررسی کردهایم. در این مطالعه، ابتدا مدلسازی ریاضی سیستم مورد مطالعه با استفاده از هامیلتونی سيستم انجام شد. سپس معادلات تحول سيستم استخراج گرديد و درنهایت، جریانهای مرتبط با اسپینهای بالا و پایین بهدست آمد. نتایج برمبنای مطالعه جریانهای اسپینی نشان میدهند که با افزايش مقدار جفتشدگي الكترون - فوتون تغييرات فاحشي در جریان اسپینی عبوری از سیستم مشاهده می شود. با افزایش مقدار جفت شدگی الکترون - فوتون، جریان اسپینی عبوری از سیستم نسبت به حالت بالستیک کاهش می یابد، اما با افزایش ولتاژ در برخى مقادير ولتاژ، با افزايش مقدار جفت شدگى الكترون -فوتون، جريان اسپيني نيز افزايش مييابد كه بيانگر يديده گذار بين باندهای الکترونی به کمک فونونها میتواند بیان شود. ازطرفی، جفتشدگي الكترون - فوتون نيز تاثير بسزايي روي جريان اسپيني عبوري از سيستم دارد، بطوريكه در مقدار جفت شدگي الكترون-فوتون پایین حتی با افزایش انرژی فوتون تغییر چندانی در جریان اسپينى مشاهده نمى شود اما زمانىكە جفتشدگى الكترون -فوتون افزايش مىيابد انرژى فوتون بەعنوان يک فاکتور كليدى عمل میکند که میتواند جریان اسپینی عبوری را کنترل کند. زمانی که انرژی فوتون به یک الکترون - ولت میرسد، بیشترین جریان اسپینی از سیستم عبور میکند. در حالت کلی میتوان گفت با تنظیم انرژی فوتون تابشی و تغییر جفتشدگی میتوان جریان اسپینی را کنترل کرد که در طراحی ابزارهای ایتوالکتریکی کاربرد دارد. سميرا فتحىزاده | ١٦

References

- Santhanakrishna, A. K. (2019) Piezoelectric ZnO Nanowires as a Tunable Interface Material for Opto-Electronic Applications. University of South Florida.
- 2- Watson, J.D., Crick, F.H. (1953) The structure of DNA, ColdSpringHarborsymposia on quantitative biology.
- 3- Peralta, M., Feijoo, S., Varela, S., Mujica, V., Medina, E. (2020) Coherence preservation and electron– phonon interaction in electron transfer in DNA. The Journal of Chemical Physics, 153(16), 165102.
- 4- Kalosakas, G. (2011) Charge transport in DNA: Dependence of diffusion coefficient on temperature and electron-phonon coupling constant. Physical Review E, 84(5), 051905.
- 5- Liao, J., Agustsson, J.S., Wu, S., Scho-nenberger, C., Calame, M., Leroux, Y., Mayor, M., Jeannin, O., Ran, Y. F., Liu, S. X., Decurtins, S. (2010) Cyclic conductance switching in networks of redox-active molecular junctions. Nano Letters, 10(3), 759-64.
- 6- Uno, S. N., Dohno, C., Bittermann, H., Malinovskii, V. L., Häner, R., Nakatani, K. (2009) A Light-Driven Supramolecular Optical Switch. Angewandte Chemie, 121(40), 7498-7501.
- 7- Huckaba, C. E., Keyes, F. G. (1948) The accuracy of estimation of hydrogen peroxide by potassium permanganate titration. Journal of the American Chemical Society, 70(4), 1640-1644.
- 8- Achilleos, D. S., Hatton, T. A., Vamvakaki, M. (2012) Light-regulated supramolecular engineering of polymeric nanocapsules. Journal of the American Chemical Society, 134(13), 5726-5729.
- 9- Liu, D., García-López, V., Gunasekera, R. S., Greer Nilewski, L., Alemany, L. B., Aliyan, A., Jin, T., Wang, G., Tour, J. M., Pal, R. (2019) Near-infrared light activates molecular nanomachines to drill into and kill cells. ACS Nano, 13(6), 6813-6823.
- 10- Braun, D., Libchaber, A. (2002). Trapping of DNA by thermophoretic depletion and convection. Physical Review Letters, 89(18), 188103.
- 11-Barnes, F.S. (1975). Applications of lasers to biology and medicine. Proceedings of the IEEE, 63(9), 1269-1278.
- 12- Behnia, S., Fathizadeh, S., Akhshani, A. (2016) DNA spintronics: Charge and spin dynamics in DNA wires. The Journal of Physical Chemistry C, 120(5), 2973-2983.

- 13- Komineas, S., Kalosakas, G., Bishop, A. R. (2002) Effects of intrinsic base-pair fluctuations on charge transport in DNA. Physical Review E, 65(6), 061905.
- 14- Guo, A. M., Sun, Q. F. (2012) Spin-selective transport of electrons in DNA double helix. Physical Review Letters, 108(21), 218102.
- 15- Simserides, C. (2014) A systematic study of electron or hole transfer along DNA dimers, trimers and polymers. Chemical Physics, 440, 31-41.
- 16- Holstein, T. (1959) Studies of polaron motion: Part I. The molecular-crystal model. Annals of physics, 8(3), 325-342.
- 17- Gao, Q., Guo, J. (2012) Quantum mechanical simulation of graphene photodetectors. Journal of Applied Physics, 112(8), 084316.
- Henrickson, L. E. (2002) Nonequilibrium photocurrent modeling in resonant tunneling photodetectors. Journal of Applied Physics, 91(10), 6273-6281.
- 19- Zhang, L., Hao, Y., Qin, W., Xie, S., & Qu, F. (2020). Chiral-induced spin selectivity: A polaron transport model. Physical Review B, 102(21), 214303.
- 20-Fransson, J. (2019). Chirality-induced spin selectivity: Theroleofelectroncorrelations. The journal of physical Chemistry Letters, 10(22), 7126-7132.
- 21- Wu, Y., & Subotnik, J. E. (2021). Electronic spin separation induced by nuclear motion near conical intersections. Nature Communications, 12(1), 700.
- 22- Das, T. K., Tassinari, F., Naaman, R., & Fransson, J. (2022). Temperature-dependent chiral-induced spin selectivity effect: Experiments and theory. The Journal of Physical Chemistry C, 126(6), 3257-3264.
- 23- Darehdor, M. A., Roknabadi, M. R., & Shahtahmassebi, N. (2019). Effects of phonon scattering on the electron transport and photocurrent of graphene quantum dot structures. The European Physical Journal B, 92(1), 1-8.
- 24- Aeberhard, U. (2011). Quantum-kinetic theory of photocurrent generation via direct and phononmediated optical transitions. Physical Review B, 84(3), 035454