

مقاله پژوهشی

مهندسی یک آشکارساز زیستی با استفاده از اثر پیزوفوتورونیک

در زنجیره‌های DNA

چکیده

امین زینال‌زاده
سمیرا فتحی‌زاده*

اهداف: پیزوفوتورونیک دانش نواظهوری است که در سال‌های اخیر توجه محققان زیادی را به خود جلب کرده است. این پدیده مبتنی بر تاثیر همزمان تابش نور و تنش مکانیکی بر تراپید الکتریکی مواد نیمه‌رساناست. در این کار، پدیده پیزوفوتورونیک در زنجیره‌های زیستی DNA مطالعه می‌شود. با بررسی همزمان این دو محرك خارجی می‌توان بهترین شرایط را برای عبور جریان الکتریکی از توالی‌های DNA بدست آورد و از آن برای طراحی آشکارسازهای اپتیکی و پیزوالکتریکی (پیزوفوتورونیکی) استفاده کرد.

گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه،
ایران

مواد و روش‌ها: در این کار، با مطالعه همزمان اثر تنش مکانیکی و نور تابشی به بررسی جریان عبوری از توالی‌های مختلف DNA می‌پردازم. ما از هامیلتونی مدل پیرارد، بیشاب و داکسیوس(PBD) که با اثرات میدان الکتریکی نور تابشی توسط لیزر و تنش مکانیکی ناشی از یک نیروی خارجی تصحیح شده است، استفاده می‌کیم. سپس با بدست آوردن معادلات تحول سیستم و محاسبه جریان الکتریکی عبوری از توالی مدنظر، تراپید الکتریکی سیستم را مطالعه می‌کنیم.

یافته‌ها: نتایج نشان می‌دهند که با تغییرات ولتاژ نواحی شباهی در نمودار مشخصه جریان - ولتاژ مشاهده می‌شود که برای طراحی یک ابزار الکتریکی رایج می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد. سپس با افزایش ولتاژ، شب نمودار مشخصه جریان - ولتاژ به منفی تغییر می‌کند، به عبارتی شاهد بروز پدیده مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR) هستیم. ناحیه NDR می‌تواند برای طراحی سوئیچ‌های قابل کنترل مورد استفاده قرار گیرد. مجدداً با افزایش ولتاژ شاهد تکرار متناوب این نواحی هستیم. بیشترین جریان از توالی CG-20 bp در دمای اتاق (300 K) عبور می‌کند و با افزایش دما جریان عبوری از توالی کاهش می‌یابد.

نتیجه‌گیری: تنش مکانیکی و تابش نور می‌توانند از عوامل تاثیرگذار بر تراپید الکتریکی یک سیستم زیستی بر مبنای DNA باشد. می‌توان گفت با تنظیم شدت و فرکانس نیروی اعمالی و نور تابشی می‌توان جریان عبوری را کنترل کرد که در طراحی ابزارهای پیزوفوتورونیکی کاربرد دارد. ابزارهای پیزوفوتورونیکی، یکی از اجزای اصلی آشکارسازها و حسگرهای زیستی هستند که می‌توانند در تشخیص بیماری‌ها و علل آنها نقش بسزایی داشته باشند.

نویسنده مسئول: سمیرا فتحی‌زاده

پست الکترونیکی:
s.fathizadeh@sci.uut.ac.ir

واژه‌های کلیدی: پیزوفوتورونیک، مقاومت دیفرانسیلی منفی، دی ان ای، تنش مکانیکی، میدان الکتریکی نور

شماره تماس: ۰۴۴۳۱۹۸۰۲۲۹

مقدمه

حسگرهای زیستی دارند، بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند^[۶]. در سال ۲۰۰۹، یک سوئیچ نوری مولکولی نور محور براساس توالی DNA پیشنهاد شد^[۷]. بهمین‌ترتیب، گزارش‌های متعددی در مورد مطالعات مختلف روی سوئیچ‌های مولکولی تاکنون وجود دارد. در سال ۲۰۱۹، وانگ و همکاران یک سوئیچ مولکولی کایرال محوری مبتنی بر نور مرئی را در یک ساختار مارپیچ نشان دادند^[۸]. توانایی تنظیم جریان الکتریکی یک دستگاه الکترونیکی تحت تابش نور که خاصیت پیزوالکتریک هم داشته باشد، 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 همزمان نیروی مکانیکی و نور تابشی بر روی توالی‌های مختلف DNA نیز می‌تواند مباحث جدیدی را در سیستم‌های مولکولی باز کند. هدف از انجام این کار، بررسی اندرکنش همزمان نیروی اعمالی و نور تابشی با توالی‌های مختلف DNA، و تاثیر آن بر نحوه عبور جریان الکتریکی از یک مولکول DNA برای طراحی و ساخت ابزارهای پیزوفوتورونیکی در ابعاد نانو بر مبنای مولکول‌های زیستی می‌باشد که در طراحی و مهندسی نانوحسگرهای زیستی و پزشکی مورد استفاده قرار می‌گیرد.

مواد و روش‌ها

در این کار، برای بررسی اثرات تابش نور از نور لیزر استفاده می‌کیم. سازوکارهای متفاوتی نظری برهمکنش گرمایی به هنگام پرتودهی نور لیزر بر بافت بیولوژیک، روی می‌دهد^[۹]. برهمکنش گرمایی از جمله واکنش‌هایی است که هنگام تابش لیزر بر روی سیستم‌های زیستی ایجاد می‌شود و کاربرد بسیاری در لیزر پزشکی بهویژه در جراحی لیزری^۱ دارد. از طرفی نور لیزر دارای خواص منحصر به‌فردی مانند تکرنگ‌بودن، تکفام‌بودن و درخشندگی در واحد زاویه فضایی، با شدت‌های متفاوت است که به طور گستردگی در علوم پزشکی و زیستی بکار برده می‌شود^[۱۰]. باید بر مبنای یک مدل ریاضی نسبت به مطالعه همزمان اثر نور و تنش مکانیکی با درنظر گرفتن عوامل

مواد زیستی در سال‌های اخیر توجه دانشمندان زیادی را به خود جلب کرده است. محققان بسیاری ریزاساختارها و عملکرد آنها را مورد مطالعه قرار داده‌اند. این مواد به‌دلیل سازگاری با طبیعت، تهیه آسان و غیرسمی‌بودن، دوستدار محیط زیست درنظر گرفته می‌شوند^[۱]. در این میان، ساختارهای مارپیچ به‌دلیل انعطاف‌پذیری بالا در صنعت و پزشکی مورد استفاده بسیاری قرار می‌گیرند. مواد زیستی از جمله اسید دنوکسی ریبونوکلئیک (DNA) به عنوان یک نانو ساختار مارپیچ شناخته می‌شود. مولکول DNA یک ماده پیزوالکتریک محسوب می‌شود^[۲]. این مولکول می‌تواند با محیط اطراف خود اندرکنش داشته و تحت تاثیر نوسانات حرارتی نیز قرار بگیرد. مطالعه خواص اپتوالکتریکی مواد زیستی به‌دلیل ویژگی‌های منحصر به‌فرد آنها و سنتز آسانشان توجه زیادی را به خود جلب کرده است. بهمین‌دلیل، ما سعی داریم تا از ویژگی‌های خاص سیستم بیومولکولی از قبیل سازگاری با سیستم‌های بیولوژیکی، ساختار خارق‌العاده، هیبریداسیون جفتی منظم و خصوصیات سازگاری برای طراحی سوئیچ و آشکارساز پیزوفوتورونیکی استفاده کنیم. خواص نوری مولکول‌های زیستی (پراکنده‌گی، جذب، شاخص انکسار، کاهش پراکنده‌گی، ناهمسانگردی) قبل^۳ مورد بررسی قرار گرفته است. ویژگی‌های نوری یک سیستم زیستی می‌تواند کاربردهای درمانی و تشخیصی نور را نیز به همراه داشته باشد. اندرکنش با نور می‌تواند شرایط مولکولی تنظیم نور را ایجاد کند^[۴]. انتقال بار ناشی از فوتون نیز خواص رسانایی سیستم را تنظیم کرده و می‌تواند برای طراحی یک نانوماشین مولکولی مورد استفاده قرار گیرد^[۵]. از طرف دیگر، اندرکنش سیستم‌های زیستی با نور و طراحی ابزارهای اپتوالکتریکی بر مبنای این مولکول‌ها توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است. در این کار، ما همزمان اثر تنش مکانیکی و نور تابشی را روی توالی‌های مختلف DNA مطالعه می‌کنیم. در سال‌های اخیر، ابزارهای اپتوالکتریکی مثل سوئیچ‌های اپتیکی بر مبنای مولکول‌های بیولوژیکی به‌دلیل نقش مهمی که به عنوان یک عنصر حیاتی در طراحی مدرن مدارهای منطقی و حافظه در

^۱ Laser Surgery

H_{Force} هامیلتونی مربوط به اعمال تنش مکانیکی است که به صورت زیر بیان می شود [۱۲]:

$$H_{Force} = -\delta_{1,n}(y_{n+1} - y_n)F \sin(\omega t) \quad (6)$$

که F و ω به ترتیب دامنه و فرکانس نیروی اعمال شده است. جمله سوم در رابطه (۱)، هامیلتونی میدان الکتریکی نور تابشی (H_{Light}) است که به صورت زیر بیان می شود [۱۳]:

$$H_{Light} = -t_{||} \sum [\exp(\frac{ie r_0}{\hbar c} A(t)) C_{n,j}^+ C_{n+1,j} + H.C] \quad (7)$$

که در رابطه (۷)، e ، r_0 و C به ترتیب بار الکتریکی، سرعت نور و فاصله ثابت بین بازهای مجاور در یک رشته است. $A(t)$ هم، بردار موج مربوط به میدان الکتریکی است که به صورت زیر نوشته می شود [۱۳]:

$$A(t) = A_0 \cos(\omega t) \exp[-\frac{(t-t_c)^2}{2\tau^2}] \quad (8)$$

که در آن A_0 ، ω و τ به ترتیب دامنه موج، فرکانس و نصف پهنهای پالس است [۱۴]. H_{Lead_DNA} هامیلتونی های مربوط به الکترودها و برهمکنش آنها با زنجیره DNA هستند که به صورت زیر بیان می شوند [۱۵ و ۱۶]:

$$H_{Lead} = \sum_{j=1,2} \sum_k (\mathcal{E}_{L_{j,k}} + \frac{eV_b}{2}) a_{L_{j,k}}^+ a_{L_{j,k}} + \sum_{j=1,2} \sum_k (\mathcal{E}_{R_{j,k}} - \frac{eV_b}{2}) a_{R_{j,k}}^+ a_{R_{j,k}} \quad (9)$$

$$H_{Lead_DNA} = \sum_{j=1,2} \sum_k (t_L a_{L_{j,k}}^+ C_{1,j} + t_R a_{R_{j,k}}^+ C_{j,N}) \quad (10)$$

در این روابط $a_{\beta_k}^+$ با $\beta = L, R$ ، $a_{\beta_k}^+$ عملگر خلق (فنا) الکترون در الکترود β ، $\mathcal{E}_{\beta_{j,k}} = 0.075$ eV انرژی روی سایت الکترودها، t_L ولتاژ بایاس و $t_R = 4.2$ eV عناصر ماتریس توغل زنی از سایت k -ام الکترود β به زنجیره DNA می باشد.

برای بدست آوردن جریان الکتریکی، ضروری است که یک اختلاف پتانسیل الکتریکی در دو انتهای سیستم ایجاد کنیم. بنابراین

محیطی دیگر همچون دما و تاثیر ولتاژ خارجی اعمال شده، پرداخت. مدل های مختلفی برای بررسی دینامیک DNA وجود دارد. ما در این کار از مدل PBH^۱ که ترکیبی از مدل PBD و هولشتاین است، استفاده می کنیم. مدل PBD برای توصیف حرکات مکانیکی DNA بیان شده است که با ترکیب آن با مدل هولشتاین، می توان تاثیر بار الکتریکی را هم در آن در نظر گرفت. درنتیجه هامیلتونی کلی سیستم به صورت زیر نوشته می شود:

$$H = H_{DNA} + H_{Force} + H_{Light} + H_{Lead} + H_{Lead-DNA} \quad (1)$$

در رابطه (۱)، H_{DNA} مربوط به هامیلتونی مدل PBH است که شامل جملات زیر است:

$$H = H_{lat} + H_{car} + H_{int} \quad (2)$$

در رابطه (۲) جمله اول، شبکه یک بعدی غیرهارمونیک DNA را مطابق مدل PBD به صورت زیر بیان می کند [۱۱، ۱۲]:

$$H_{lat} = \sum_n \frac{1}{2} m \dot{y}_n^2 + V(y_n) + W(y_n, y_{n+1}) \quad (3)$$

جمله دوم، هامیلتونی حامل های بار الکتریکی در تغیر نزدیکترین همسایگی است که به صورت زیر نوشته می شود:

$$H_{car} = \sum_n [\mathcal{E}_n C_n^+ C_n - V_{n,n+1} (C_{n+1}^+ C_n + C_{n+1}^+ C_n)] \quad (4)$$

که در آن C_n^+ عملگر خلق و نابودی الکترون در سایت n است. \mathcal{E}_n انرژی الکترون در سایت ها و $V_{n,n+1}$ انرژی جمیش الکترون بین نزدیکترین همسایگی است. جمله سوم در رابطه (۲) برهمکنش الکترون - شبکه هولشتاین گونه است [۱۱] که به فرم زیر بیان می شود:

$$H_{int} = \chi \sum_n y_n C_n^+ C_n \quad (5)$$

ثابت اندرکنش الکترون - شبکه می باشد. χ

^۱ Peyrard-Bishop-Holstein

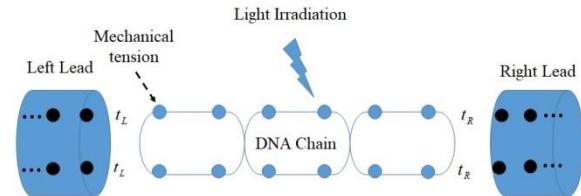
موقعی متاظر با $n_i = C_i^+ C_i^-$ است. بنابراین عملگر جریان الکتریکی کل $I(t) = \sum_i I_i$ در حالت پایدار بدست می‌آید.

عوامل مختلفی از جمله تنش مکانیکی اعمال شده، باباس الکتریکی اعمال شده، خواص نور، توالی جفت بازهای DNA و عوامل محیطی همچون دما می‌توانند بر روی سیستم ما تاثیرگذار باشد. انرژی‌های در سایت و ثابت‌های پرش الکترون بین جفت بازهای DNA در جدول ۱ نشان داده شده‌اند [۱۶]. پارامترهای مورد استفاده در مدل به صورت جدول ۲ است:

جدول ۱: انرژی‌های در سایت برای جفت بازهای مختلف و ثابت‌های پرش بین جفت بازهای مجاور [۱۸].

مقدار	پارامتر
-۴/۹ eV	ϵ_{A-T}
-۴/۵ eV	ϵ_{C-G}
-۲۹ meV	t_{TT}, t_{AA}
+۰/۵ meV	t_{AT}
۳ meV	t_{CT}, t_{AG}
۲ meV	t_{TA}
۱۷ meV	t_{CA}, t_{TG}
-۱ meV	t_{TC}, t_{GA}
۲۰ meV	t_{CC}, t_{GG}
-۱۰ meV	t_{GC}
-۸ meV	t_{CG}

مطابق شکل ۱، DNA را به دو الکترود با اختلاف پتانسیل V_b متصل می‌کنیم.



شکل ۱- زنجیره دو رشته‌ای مولکول DNA متصل به الکتروودها

برای بررسی رفتار دینامیکی سیستم با استفاده از معادله هامیلتونی $\dot{p}_n = -\frac{\partial H}{\partial q_n}$ ، معادلات تحول قسمت کلاسیک و

نوسانات جفت بازها را بدست می‌آوریم که در آن p_n تکانه خطی تعیین یافته متناظر با مختصات تعیین یافته q_n است. معادلات تحول حاکم بر قسمت الکترونی را نیز با استفاده از معادله هایزنبرگ بدست می‌آوریم.

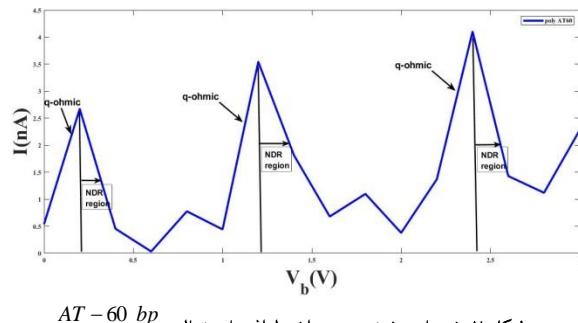
در این مطالعه، بیشتر جملات هامیلتونی غیرخطی بوده و حساسیت زیادی نسبت به شرایط اولیه دارند. با استفاده از تحلیل سری زمانی حاصل از معادلات تحول DNA، منتجه می‌شویم که تحول فضایی این مولکول همانند تحول سیستم‌های آشوبناک است. برای مدل‌سازی اثر دما از ترموموستات نوز - هوور (Nose - Hoover) [۱۷] به عنوان منبع حرارت استفاده می‌کنیم.

معادله تحول ترموموستات به صورت $\dot{y}_n^2 = \frac{1}{M} \sum m y_n^2 - N K_B T$ تعریف می‌شود که در این رابطه M ثابت ترموموستات نوز - هوور است که مقدار آن $M = 1000$ و T دمای ترموموستات و ثابت بولتزمن است. معادلات حاکم بر قسمت الکترونی با استفاده از معادله هایزنبرگ $(\dot{a}_n = -\frac{i}{\hbar} [a_n, H])$ بدست می‌آیند.

با استفاده از معادله پیوستگی برای چگالی جریان، عملگر جریان الکتریکی وابسته به زمان بدست می‌آید، به طوری که

$$I_i - I_{i-1} = e \frac{dn_i}{dt} = -\frac{ie}{\hbar} [n_i, H]$$

تغییر می‌کند. این پدیده را می‌توان به عنوان پدیده دیفرانسیلی منفی (*NDR*) بیان کرد [۲۱-۲۲]. دوباره با افزایش ولتاژ شاهد تکرار متنابع این نواحی هستیم. (شکل ۲). نواحی شباهتمی و *NDR* قبلًا در نمودارهای مشخصه *V-I*-DNA مشاهده شده است [۲۳].



شکل ۲- نمودار مشخصه جریان-ولتاژ برای توالی

$$F_0 = 0.01 pN, \omega_{Force} = 0.5 THz, A_0 = 0.2 \frac{\hbar c}{ie r_0}, \omega_{ph} = 0.1 THz, T_{gzHg} = 300 k$$

تأثیر دامنه و فرکانس نیروی اعمالی بر توالی‌ها
با ثابت‌گرفتن ولتاژ، دما، دامنه و فرکانس نور تابشی، ابتدا تأثیر شدت نیروی مکانیکی را بر توالی‌ها بررسی می‌کنیم، سپس تأثیر فرکانس نیروی اعمالی را بر توالی‌ها و تأثیر آن بر میزان جریان عبوری از توالی را مطالعه می‌کنیم. با توجه به ثابت‌گرفتن عوامل تاثیرگذار دیگر،

$$V_b = cte, \omega_{Force} = 0.5 THz, A_0 = 0.2 \frac{\hbar c}{ie r_0}, \omega_{ph} = 0.1 THz, T_{gzHg} = 300 k$$

دامنه نیرو را برای توالی‌ها از صفر تا ۵ پیکو نیوتون (pN) تغییر داده و تأثیر آن را بر میزان و نحوه عبور جریان الکتریکی از طول توالی را بررسی کردیم.

همان‌طورکه در شکل ۳ مشاهده می‌شود، جریان عبوری از توالی به صورت غیرخطی و شدیداً نوسانی است و با تغییر دامنه نیرو میزان جریان عبوری نیز تغییر می‌کند که نشان‌دهنده وجود خاصیت پیزاکتریک در توالی *AT - 40 bp* است. در این شرایط بیشترین جریان عبوری در دامنه $F_0 = 1.6 pN$ اتفاق افتاد، که مقدار آن ۶.۵ nA است.

جدول ۲: پارامترهای مورد استفاده در مدل PBD [۲۰ و ۱۹]

نماد	توصیف	واحد	مقدار
m	جرم جفت باز	amu	۳۰۰
a_{AT}	عرض پتانسیل مورس برای AT جفت پایه	A^{-1}	۴/۵
a_{CG}	عرض پتانسیل مورس برای CG جفت پایه	A^{-1}	۶/۹
D_{AT}	عمق پتانسیل مورس برای AT جفت پایه	eV	۰/۰۵
D_{CG}	عمق پتانسیل مورس برای CG جفت پایه	eV	۰/۰۷۵
κ	ثابت اتصال	eV / A^2	0.025
ρ	پارامتر پتانسیل توده ای		۰/۵
b	ثابت میرایی	A^{-1}	۰/۳۵

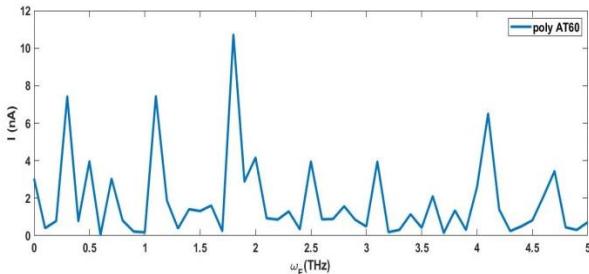
یافته ها

تأثیر میدان الکتریکی بر توالی‌ها

با ثابت‌گرفتن دامنه و فرکانس نیروی مکانیکی اعمالی و نور تابشی، تأثیر ولتاژ اعمالی را بر روی توالی‌ها را در دمای $K = 300$ با ثابت‌گرفتن دامنه و فرکانس نیروی مکانیکی اعمالی و نور تابشی، تأثیر ولتاژ اعمالی را بر روی توالی‌ها در یک سیستم بیومولکولی از طریق بررسی می‌کنیم. انتقال جریان در یک مطالعه اخیر تأثیر ولتاژ را بر رسانایی الکتریکی ناشی از خاصیت پیزاکتریک و تابش نور در قالب منحنی مشخصه جریان - ولتاژ بررسی می‌کنیم. بهمین خاطر توالی‌های مورد نظر رابه الکترودهایی با ولتاژ قابل تنظیم متصل می‌کنیم.

مولکول *DNA* رفتارهای متفاوتی در برابر تغییر ولتاژ اعمال شده، از خود نشان می‌دهد. همان‌طورکه در شکل ۲ مربوط به توالی *AT* با طول ۶۰ جفت باز مشاهده می‌شود، نواحی شباهتمی و مقاومت دیفرانسیلی منفی (*NDR*) ظاهر می‌شوند. برای یک دامنه و فرکانس ثابت برای نور تابشی در شدت و فرکانس ثابتی از تنش مکانیکی، در ابتدا شاهد رفتار شباهتمی در سیستم هستیم. با افزایش پتانسیل اعمالی شبیه نمودار *I-V* به منفی

جریان عبوری را ببررسی می کنیم. همان طورکه در شکل ۵ مشاهده می کنیم، جریان عبوری از توالی به صورت غیرخطی است و با تغییر فرکانس نیرو میزان جریان عبوری نیز تغییر می کند، که نشان دهنده وجود خاصیت پیزوالکتریک در این توالی هاست. بیشترین جریان عبوری از توالی $AT - 60\text{ bp}$ در فرکانس $\omega_{Force} = 1.8\text{ THz}$ می افتد که مقدار آن $10.73nA$ است (شکل ۵).



شكل ٥- نمودار جریان بر حسب فرکانس نیروی اعمالی

$$V_b = 2.4V, F_0 = 2.9\text{ }pN, A_0 = 0.2 \frac{\hbar c}{ie r_0}, Q_{ph} = 0.1THz, T = 300K$$

تاثیر دامنه نور تایشی بر توالی‌ها

در این قسمت تاثیر دامنه نور تابشی را برای توالی‌ها مورد بررسی قرار می‌دهیم. با ثابت‌گرفتن دیگر عوامل تاثیرگذار، دامنه نور تابشی را از صفر تا ۱ در واحد $\frac{\hbar c}{ier_0}$ تغییر داده و تاثیر آن را بر جریان عبوری از

توالی بررسی می‌کنیم. با توجه به شکل ۶ در توالی AT با طول $\hbar c$

توالی بررسی می‌کنیم. با توجه به شکل ۶ در توالی AT با طول ۲۰

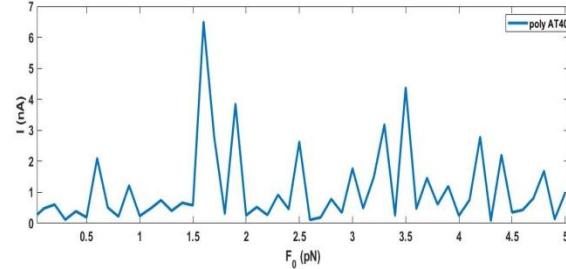
جفت باز مشاهده می‌کنیم که تا $A_0 = 0.2 \frac{\hbar c}{ier_0}$ جریان عبوری

تقریباً صفر است. در دو ناحیه یعنی از $A_0 = 0.4 \frac{\hbar c}{ier_0}$ تا

$$A_0 = 0.9 \frac{\hbar c}{ier} \quad \text{و} \quad A_0 = 0.5 \frac{\hbar c}{ier}$$

که می توان از این شرایط به عنوان آشکارساز استفاده کرد و بیشترین

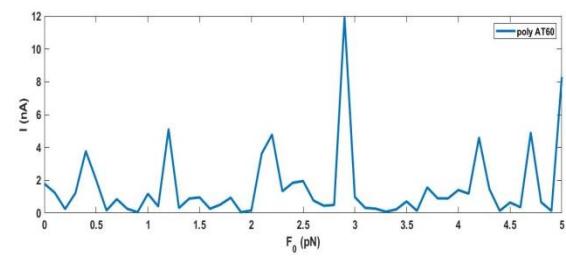
مقدار جریان نیز در $A_0 = 0.9 \frac{hc}{ier_0}$ و مقدار آن $nA = 3.26$ است.



شکل ۳- نمودار جریان بر حسب دامنه نیروی اعمالی

$$V_b = 4.8V, \mathcal{O}_{Force} = 0.5THz, A_0 = 0.2 \frac{\hbar c}{ie r_0}, \mathcal{O}_{ph} = 0.1THz, T = 300K$$

در توالی AT با طول ۶۰ جفت باز نیز با ثابتگرفتن عوامل تاثیرگذار دیگر، دامنه نیرو را برای توالی از صفر تا ۵ پیکو نیوتون (pN) تغییرداده و تاثیر آن را بر میزان و نحوه عبور جریان الکتریکی از طول توالی را بررسی کردیم. همان‌طور که در شکل ۴ می‌بینیم، جریان عبوری از توالی به صورت غیرخطی است و با تغییر دامنه نیرو میزان جریان عبوری نیز تغییر می‌کند، که نشان‌دهنده وجود خاصیت پیزوالکتریک در توالی $bp - 60 - AT$ است. در این شرایط بیشترین جریان عبوری در دامنه $N = 2.9 pN$ اتفاق افتاد که مقدار آن $11.92 nA$ است.



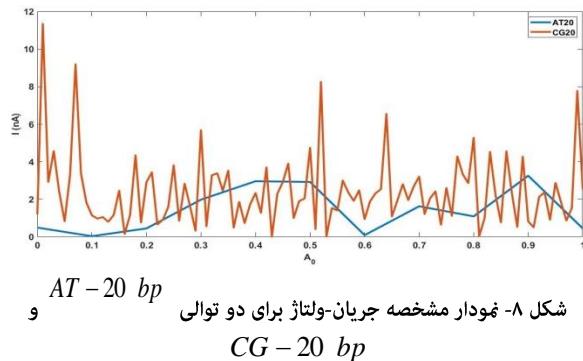
شکل ۴- نمودار جریان بر حسب دامنه نیروی اعمالی

$$V_b = 2.4V, \mathcal{O}_{Force} = 0.5THz, A_0 = 0.2 \frac{\hbar c}{ie r_0}, \mathcal{O}_{ph} = 0.1THz, T = 300K$$

تاثیر فرکانس نیروی اعمالی بر توالی‌ها

فرکانس نیروی اعمالی را برای توالی‌ها از صفر تا ۵ تراهرتز (Hz) تغییر داده و تاثیر آن را بر میزان و نحوه عبور جریان الکتریکی از طول توالی را بررسی کردیم. برای توالی AT با طول‌های 60 جفت باز

شدید است ولی جریان عبوری از توالی $AT - 20\text{ bp}$ نوسانات آرام و کمتری دارد.

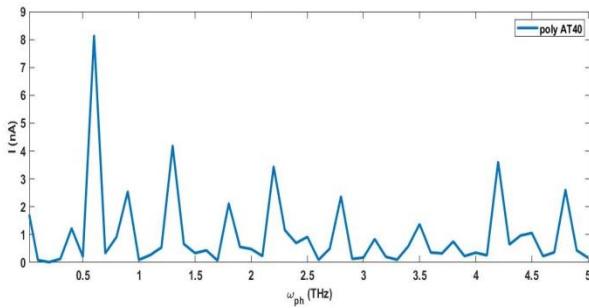


شکل ۸- نمودار مشخصه چریان-ولتاژ برای دو توالی $AT - 20\text{ bp}$ و $CG - 20\text{ bp}$

تأثیر فرکانس نور تابشی بر توالی‌ها

در این قسمت تأثیر فرکانس نور تابشی را برای توالی‌ها مورد بررسی قرار می‌دهیم. با ثابت‌گرفتن دیگر عوامل تاثیرگذار، فرکانس نور تابشی را از صفر تا 5 THz تغییرداده و تأثیر آن را بر جریان عبوری از توالی بررسی می‌کنیم.

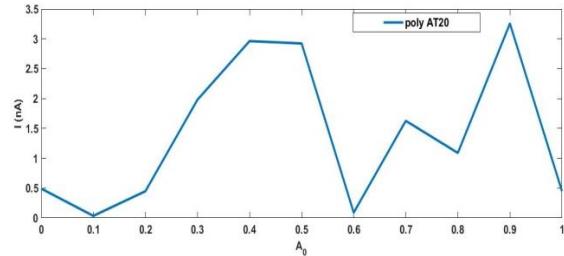
با توجه به شکل ۹ در توالی AT با طول 40 \mu m ۴۰ جفت باز مشاهده می‌کنیم که $\omega_{photon} = 0.6\text{ THz}$ جریان قابل توجهی از توالی عبور می‌کند که مقدار آن 8.13 nA است.



شکل ۹- نمودار جریان بر حسب فرکانس نور تابشی

$$V_b = 4.8V, F_0 = 1.6pN, A_0 = 0.05 \frac{\hbar c}{ie r_0}, \mathcal{O}_{Force} = 0.7\text{ THz}, T = 300K$$

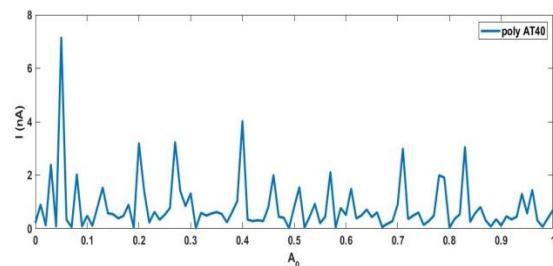
مطابق شکل ۱۰ در توالی AT با طول 60 \mu m ۶۰ جفت باز مشاهده می‌کنیم که در $\omega_{photon} = 0.8\text{ THz}$ جریان قابل توجهی از توالی $AT - 60\text{ bp}$ عبور می‌کند که مقدار آن 15.43 nA است.



شکل ۶- نمودار جریان بر حسب دامنه نور تابشی

$$V_b = 10V, F_0 = 2.2pN, \mathcal{O}_{Force} = 0.8 \frac{\hbar c}{ie r_0}, \mathcal{O}_{ph} = 0.1\text{ THz}, T = 300K$$

حال با ثابت‌گرفتن دیگر عوامل تاثیرگذار، دامنه نور تابشی را از صفر تا ۱ در واحد $\frac{\hbar c}{ie r_0}$ تغییرداده و تأثیر آن را بر جریان عبوری از توالی AT با طول 40 \mu m جت باز بررسی کردیم. با توجه به شکل ۷ که مربوط به توالی $AT - 40\text{ bp}$ است، مشاهده می‌کنیم که در چند نقطه جریان به حداقل مقدار خود رسیده (پیک جریان) و دوباره به صفر می‌رسد. از این شرایط می‌توان به عنوان آشکارساز استفاده کرد. بیشترین مقدار جریان نیز در $A_0 = 0.05 \frac{\hbar c}{ie r_0}$ و مقدار آن 8.13 nA است.



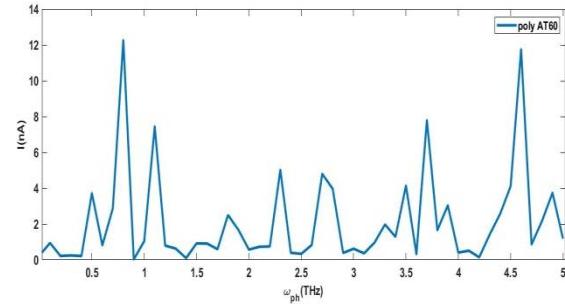
شکل ۷- نمودار جریان بر حسب دامنه نور تابشی

$$V_b = 4.8V, F_0 = 1.6pN, \mathcal{O}_{Force} = 0.7 \frac{\hbar c}{ie r_0}, \mathcal{O}_{ph} = 0.1\text{ THz}, T = 300K$$

حال تأثیر دامنه نور تابشی را برای دو توالی $AT - 20\text{ bp}$ و $CG - 20\text{ bp}$ مقایسه می‌کنیم. با توجه به شکل ۸ مشاهده می‌کنیم که جریان عبوری از توالی $CG - 20\text{ bp}$ دارای نوسانات

نتیجه‌گیری

اندرکنش با تنش مکانیکی و تابش نور می‌تواند از عوامل تاثیرگذار بر نحوه عبور جریان الکتریکی در سیستم‌های زیستی باشد. ما در این کار، تاثیر اندرکنش همزمان نور تابشی و نیروی اعمالی و با درنظر گرفتن اثرات دمای محیط بر DNA را به صورت تئوری بررسی کرده‌ایم. در این مطالعه، ابتدا مدل‌سازی ریاضی سیستم مورد مطالعه با استفاده از هامیلتونی سیستم انجام شد. سپس معادلات تحول سیستم استخراج گردید و درنهایت، میزان و نحوه عبور جریان الکتریکی از توالی‌ها در شرایط مختلف بدست آمد. نتایج بر مبنای مطالعه جریان‌های عبوری نشان می‌دهند که با اعمال نیرو بر توالی‌ها و تغییر دامنه و فرکانس نیرو جریان‌های عبوری به صورت غیرخطی تغییر می‌کند که این گواهی بر خاصیت پیزوالکتریک مولکول DNA است. کشف هیجان‌انگیز هدایت نوری کنترل شده و انتقال بار، زمینه سوئیچ‌های مولکولی نوری را باز می‌کند. در مطالعه فعلی، جریان الکتریکی به عنوان سیگنال الکتریکی خروجی، رفتار نوسانی مرتبط با نور فروودی را نشان می‌دهد. نوسان ناشی از نور می‌تواند به دلیل باز توزیع بار الکتریکی در نزدیکی اتصالات با الکتروودها در پاسخ به محرك‌های خارجی باشد. در این مطالعه، یک طرح آشکارساز برای تابش تراهertz بر روی پلت فرم DNA ارائه شده است. مطالعات نشان می‌دهند که پلارون شبکه DNA، نوسانات منسجمی را هنگام اتصال به ولتاژ بایاس نشان می‌دهد. نوسانات شناسایی شده در فواصل زمانی کوتاه شبکه هارمونیک هستند و فرکانس آن با فرکانس بلوخ برای میدان الکتریکی یکنواخت مطابقت دارد. فرکانس بلوخ یک سیستم در DNA محدوده تراهertz است. در نمودارهای مشخصه I-V، می‌توانیم رفتار NDR و رفتار شبکه‌ای را مشاهده کنیم. NDR در مطالعات قبلی سوئیچ‌های مولکولی ظاهر شده است. اگر ولتاژ اعمال شده، سطح پتانسیل موضعی را به اندازه کافی بالا ببرد تا حالت اکسیداسیون مولکول را تغییر دهد، رفتار NDR در سیستم مشاهده می‌شود. رفتار NDR طیف گسترده‌ای از کاربردها، از جمله تقویت‌کننده، مدارهای منطق، و حافظه، و همچنین سوئیچینگ سریع را پوشش می‌دهد. مکانیسم بروز NDR را می‌توان به صورت زیر توضیح داد: هنگامی که



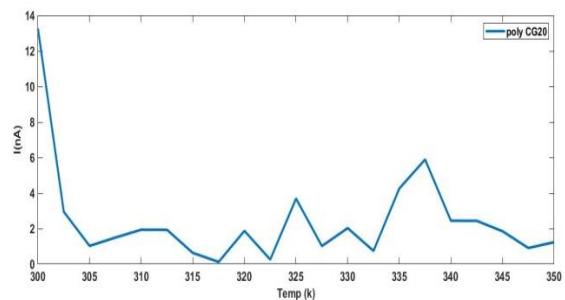
شکل ۱۰- نمودار جریان بر حسب فرکانس نور تابشی

$$V_b = 2.4V, F_0 = 2.9pN, A_0 = 0.96 \frac{\hbar c}{ie r_0}, \omega_{Force} = 1.8THz, T = 300K$$

تأثیر دمای محیط

دمای محیط از عوامل تاثیرگذار در مطالعه خواص انتقال بار در DNA است. دمای محیط را به وسیله ترمومتر می‌توان کنترل کرد. به عبارتی یک ترمومتر دینامیک مولکولی، حمام حرارتی را به کل سیستم یا به بخشی از آن وصل می‌کند [۲۲].

رفتار جریان الکتریکی عبوری از توالی CG - 20 bp در شکل ۱۱ بررسی شده است. دما را از دمای اتاق (300K) تا دمای 350K تغییر دادیم. مشخص است با افزایش دما جریان عبوری از توالی کاهش می‌یابد به طوری که بیشترین جریان در دمای اتاق یعنی 300K عبور می‌کند که مقدار آن 13.27nA است.



شکل ۱۱- نمودار جریان بر حسب دمای محیط

$$V_b = 0.4V, F_0 = 0.6pN, A_0 = 0.01 \frac{\hbar c}{ie r_0}, \omega_{Force} = 1.3THz, \omega_{ph} = 1.9THz$$

با تغییر دامنه نور تابشی شاهد نقاط دارای پیک جریان هستیم که از آن می‌توان به عنوان آشکارساز استفاده کرد. با بررسی اثرات دمای محیط متوجه شدیم بیشترین جریان در دمای اتاق (300K) از توالی عبور می‌کند و با افزایش دما شاهد افت جریان عبوری از توالی هستیم. در حالت کلی می‌توان گفت با تنظیم نیروی مکانیکی اعمالی و نور تابشی می‌توان برای طراحی و مهندسی ابزارهای پیزوفوتونیکی برای کاربرد در آشکارسازها و حسگرها استفاده کرد.

یک ولتاژ بایاس به مولکول DNA اعمال می‌شود، در رژیم تراپید غیرخطی، بار الکتریکی اضافی بدست می‌آید. این بار که در اوربیتال مولکولی تا حدی اشغال شده در سطح فرمی قرار دارد، سهم اصلی را در انتقال الکترون از طریق مولکول DNA ایفا می‌کند. با افزایش ولتاژ بایاس، اوربیتال تا حدی اشغال شده بار بیشتری بدست می‌آورد و سهم الکترواستاتیکی در انرژی آن در ارتباط با پتانسیل الکتروشیمیایی الکترود منبع افزایش می‌باید. اگر انرژی این اوربیتال مولکولی بسیار بالاتر از پتانسیل الکتروشیمیایی الکترود تخلیه باشد، شار الکترونی در جهت مثبت با افزایش ولتاژ بایاس به صفر نزدیک می‌شود، در حالی که شار الکترونی در جهت معکوس افزایش قابل توجیهی ندارد. بنابراین، جریان خالص از طریق مولکول DNA اشبع می‌شود. علاوه براین، یک اغتشاش کوچک در مولکول DNA ایجاد از طریق تابش می‌تواند جابجایی‌های اتمی در مولکول DNA ایجاد کند، مانند طولانی‌شدن و تضعیف پیوندهای مولکولی خاص. از این‌رو، هم توزیع مجدد بار در نزدیکی اتصال‌ها با الکتروودها و هم نور تابشی در وقوع NDR در سیستم ما شرکت می‌کنند. افزایش بیشتر ولتاژ بایاس منجر به آرایش فضایی بیشتر ساختار الکترونیکی سیستم و توزیع مجدد بار الکتریکی در نزدیکی اتصال‌ها می‌شود. این عامل باعث تغییر ساختار الکترونیکی بین مولکول و اتصال‌ها و در نتیجه باعث افزایش جریان می‌شود. بنابراین، پدیده NDR به طور متوالی در سیستم ظاهر می‌شود.

References:

- 1- Santhanakrishna, A. K. (2019) Piezoelectric ZnO Nanowires as a Tunable Interface Material for Opto-Electronic Applications. University of South Florida.
- 2- Fathizadeh, S., Behnia, S. (2020) Control of a DNA based piezoelectric biosensor. Journal of Physical Society of Japan, 89, 024004.
- 3- Jacques,S.L.(2013).Optical properties of biological tissues: a review. Physics in Medicine & Biology, 58(11), R37.
- 4- 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.
- 5- Liu, D., García-López, V., Gunasekera, R. S., Nilewski, L. G., Alemany, L. B., Aliyan, A., ... & Pal, R. (2019) Near Infrared Light Activates Molecular Nanomachines to Drill Into and Kill Cells. ACS Nano
- 6- Liao, J., Agustsson, J.S., Wu, S., Schonenberger, 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.
- 7- 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.
- 8- 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.
- 9- Braun, D., Libchaber, A. (2002) Trapping of DNA by thermophoretic depletion and convection. Physical Review Letters, 89(18), 188103.
- 10- Barnes, F. S. (1975). Applications of lasers to biology and medicine. Proceedings of the IEEE, 63(9), 1269-1278.
- 11- Weiner, J. H., & Askar, A. (1970) Proton migration in hydrogen-bonded chains. Nature, 226(5248), 842-844.
- 12- Dauxois, T., Peyrard, M., & Bishop, A. R. (1993) Entropy-driven DNA denaturation. Physical Review E, 47(1), R44.
- 13- Behnia, S., Fathizadeh, S., Javanshour, E., Nemati, F. (2020) Light-driven modulation of electrical current through DNA sequences: Engineering of a molecular optical switch. The Journal of Physical Chemistry B, 124(16), 3261-3270.
- 14- Zhang, L. L., Xie, S. J., & Kang, D. W. (2017) Role of photoresponse of π electrons in light-driven DNA dissociations. Physical Review E, 96(2), 022414.
- 15- Behnia, S., Fathizadeh, S., & Ziae, J. (2017) Controlling charge current through a DNA based molecular transistor. Physics Letters A, 381(1), 36-43.
- 16- Chen, Z. Z., Lü, R., & Zhu, B. F. (2005) Effects of electron-phonon interaction on nonequilibrium transport through a single-molecule transistor. Physical Review B, 71(16), 165324.
- 17- Behnia, S., Fathizadeh, S., & Akhshani, A. (2015) DNA in a Dissipative Environment: A Charge Transfer Approach. Journal of the Physical Society of Japan, 84(8), 084002.
- 18- Simserides, C. (2014) A systematic study of electron or hole transfer along DNA dimers, trimers and polymers. Chemical Physics, 440, 31-41.
- 19- 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.
- 20- Hillebrand, M., Kalosakas, G., Schwellnus, A., & Skokos, C. (2019) Heterogeneity and chaos in the Peyrard-Bishop-Dauxois DNA model. Physical Review E, 99(2), 022213.
- 21- Zhang, C., He, Y., Cheng, H. P., Xue, Y., Ratner, M. A., Zhang, X. G., & Krstic, P. (2006) Current-voltage characteristics through a single light-sensitive molecule. Physical Review B, 73(12), 125445.
- 22- Chen, F., He, J., Nuckolls, C., Roberts, T., Klare, J. E., & Lindsay, S. (2005) A molecular switch based on potential-induced changes of oxidation state. Nano Letters, 5(3), 503-506.
- 23- Behnia S, Fathizadeh S, Akhshani A. (2015) DNA in a dissipative environment: a charge transfer approach. Journal of the Physical Society of Japan. 84(8), 084002.