لیزر در پزشکی ۱۴۰۲/ دوره ۲۰ / شماره (۱) / صفحات ۵۲-۴۳

مقاله پژوهشی

مهندسی یک آشکارساز زیستی با استفاده از اثر پیزوفوتوترونیک در زنجیره‌های DNA

امین زینال‌زاده

سمیرا فتحی‌زاده*

گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران

چکیده

اهداف: پیزوفوتوترونیک دانش نوظهوری 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 ترابرد الکتریکی مواد نیمه‌رساناست. در این کار، پدیده پیزوفوتوترونیک در زنجیره‌های زیستی DNA مطالعه می‌شود. با بررسی همزمان این دو محرک خارجی می‌توان بهترین شرایط را برای عبور جریان الکتریکی از توالی‌های DNA بدست آورد و از آن برای طراحی آشکارسازهای اپتیکی و پیزوالکتریکی (پیزوفوتوترونیکی) استفاده کرد.

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

یافته‌ها: نتایج نشان می‌دهند که با تغییرات ولتاژ نواحی شبه‌اهمی در نمودار مشخصه جریان - ولتاژ مشاهده می شود که برای طراحی یک ابزار الکتریکی رایج می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد. سپس با افزایش ولتاژ، شیب نمودار مشخصه جریان - ولتاژ به منفی تغییر می‌کند، به عبارتی شاهد بروز پدیده مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR) هستیم. ناحیه NDR می تواند 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 ترابرد الکتریکی یک سیستم زیستی برمبنای DNA باشد. می‌توان گفت با تنظیم شدت و فرکانس نیروی اعمالی و نور تابشی می‌توان جریان عبوری را کنترل کرد که در طراحی ابزارهای پیزوفوتوترونیکی کاربرد دارد. ابزارهای پیزوفوتوترونیکی، یکی از اجزای اصلی آشکارسازها و حسگرهای زیستی هستند که می‌توانند در تشخیص بیماری‌ها و علل آنها نقش بسزایی داشته باشند.

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

نویسنده مسئول : سمیرا فتحی‌زاده

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

شماره تماس : ۰۴۴۳۱۹۸۰۲۲۹

[Downloaded from icml.ir on 2026-11-24]

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 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 ازجمله اسید دئوکسی ریبونوکلئیک (DNA) به‌عنوان 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 منحصربه‌فرد آنها و سنتز آسانشان توجه زیادی را به خود جلب کرده است. به‌همین‌دلیل، 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 پیزوفوتوترونیکی استفاده کنیم. خواص نوری مولکول‌های زیستی (پراکندگی، جذب، شاخص انکسار، کاهش پراکندگی، ناهمسان‌گردی) قبلاً مورد بررسی قرار گرفته است[۳]. 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 تنظیم‌کرده و می‌تواند برای طراحی یک نانوماشین مولکولی مورد استفاده قرار گیرد[۵]. از طرف دیگر، اندرکنش سیستم‌های زیستی با نور و طراحی ابزارهای اپتوالکتریکی برمبنای 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 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 گرفته‌اند[۶]. در سال ۲۰۰۹، یک سوئیچ نوری مولکولی نور محور براساس توالی DNA پیشنهاد شد [۷]. به‌همین‌ترتیب، 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 الکترکی از یک مولکول DNA برای طراحی و ساخت ابزارهای پیزوفوتوترونیکی در ابعاد نانو برمبنای مولکول‌های زیستی می باشد 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 می‌کنیم. سازوکارهای متفاوتی نظیر برهمکنش گرمایی به هنگام پرتودهی نور لیزر بر بافت بیولوژیک، روی می‌دهد [۹]. برهمکنش گرمایی ازجمله واکنش‌هایی است که هنگام تابش لیزر بر روی سیستم‌های زیستی ایجاد می‌شود وکاربرد بسزایی در لیزر پزشکی به‌ویژه در جراحی لیزری[1] دارد. از طرفی 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[۱۰]. باید برمبنای یک مدل ریاضی نسبت به مطالعه همزمان اثر نور و تنش مکانیکی با درنظر گرفتن عوامل

[1] Laser Surgery

[Downloaded from icml.ir on 2026-11-24]

محیطی دیگر همچون دما و تاثیر ولتاژ خارجی اعمال‌شده، پرداخت. مدل‌های مختلفی برای بررسی دینامیک DNA وجود دارد. ما در این کار از مدل PBH[1] 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، می‌توان تاثیر بارالکتریکی را هم در آن درنظر گرفت. درنتیجه هامیلتونی کلی سیستم به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = H_{DNA} + H_{Force} + H_{Light} + H_{Lead} + H_{Lead-DNA} \quad (۱)$$

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

$$H = \mathrm{H_{lat}} + H_{car} + H_{int} \quad (۲)$$

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

$$H_{lat} = \sum_n \frac{1}{2} m \dot{y}^2 + V(y_n) + W(y_n \text{ و } y_{n+1}) \quad (۳)$$

جمله دوم، هامیلتونی حامل‌های بار الکتریکی در تقریب نزدیکترین همسایگی است که به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H_{car} = \sum_n [\varepsilon_n C_n^+ C_n - V_{n,n+1}(C_{n+1}^+ C_n + C_{n+1}^+ C_n)] \quad (۴)$$

که در آن C_n^+ و C_n عملگر خلق و نابودی الکترون در سایت n-ام است. ε_n انرژی الکترون در سایت‌ها و $V_{n,n+1}$ انرژی جهش الکترون بین نزدیکترین همسایگی است. جمله سوم در رابطه (۲) برهمکنش الکترون - شبکه هولشتاین گونه است[۱۱]که به فرم زیر بیان می‌شود:

$$\mathrm{H_{int}} = \chi \sum_n \mathrm{y_n C_n^+ C_n} \quad (۵)$$

ثابت اندرکنش الکترون - شبکه می‌باشد. χ

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

$$\mathrm{H_{Force}} = -\delta_{1,n}(\mathrm{y_{n+1}} - \mathrm{y_n})\mathrm{Fsin}(\omega t) \quad (۶)$$

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 به‌صورت زیر بیان می شود[۱۳]:

$$\mathrm{H_{Light}} = -\mathrm{t_{\parallel}} \sum [\exp(\frac{ier_0}{\hbar c} \mathrm{A(t)}) \mathrm{C_{n,j}^+ C_{n+1,j}} + \mathrm{H.C}] \quad (۷)$$

که در رابطه (۷)، e، c و r_0 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 به‌صورت زیر نوشته می‌شود[۱۳]:

$$\mathrm{A(t)} = A_0 \cos(\omega t) \exp[-\frac{(t-t_c)^2}{2\tau^2}] \quad (۸)$$

که در آن A_0، ω و τ به ترتیب دامنه موج، فرکانس و نصف پهنای پالس است[۱۴]. $\mathrm{H_{Lead}}$ و $\mathrm{H_{Lead_DNA}}$ هامیلتونی‌های مربوط به الکترودها و برهمکنش آنها با زنجیره DNA هستند که به‌صورت زیر بیان می شوند[۱۵و۱۶]:

$$H_{Lead} = \sum_{j=1,2} \sum_k (\varepsilon_{L_{j,k}} + \frac{eV_b}{2}) a_{L_{j,k}}^+ a_{l_{j,k}} + \sum_{j=1,2} \sum_k (\varepsilon_{R_{j,k}} - \frac{eV_b}{2}) a_{R_{j,k}}^+ a_{R_{j,k}} \quad (۹)$$

$$\mathrm{H_{Lead_DNA}} = \sum_{j=1,2} \sum_k (\mathrm{t_L} a_{L_{j,k}}^+ C_{1,j} + t_R a_{R_{j,k}}^+ C_{j,N}) \quad (۱۰)$$

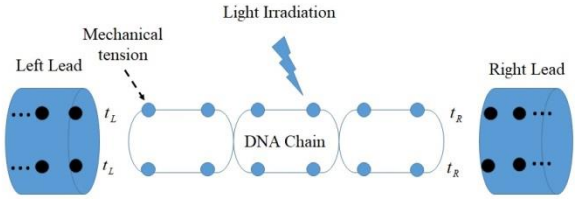
در این روابط $a_{\beta_k}^+$ (a_{β_k}) با $\beta = L, R$، عملگر خلق (فنا) الکترون در الکترود β، $\varepsilon_{\beta_{j,k}} = 0.075\ eV$ انرژی روی سایت الکترودها، V_b ولتاژ بایاس و $t_\beta = 4.2\ eV$ عناصر ماتریس تونل زنی از سایت k-ام الکترود β به زنجیره DNA می‌باشند.

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

[1] Peyrard–Bishop–Holstein

[Downloaded from icml.ir on 2026-11-24]

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



شکل ۱- زنجیره دو رشته‌ای مولکول DNA متصل به الکترودها

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 تعمیم‌یافته متناظر با مختصات تعمیم 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 غیرخطی‌بوده و حساسیت زیادی نسبت به شرایط اولیه دارند. با استفاده از تحلیل سری زمانی حاصل از معادلات تحول DNA ، متوجه می‌شویم که تحول فضایی این مولکول همانند تحول سیستم‌های آشوبناک است.

برای مدل‌سازی اثر دما از ترموستات نوز - هوور ($Nose_Hoover$)[۱۷] به‌عنوان منبع حرارت استفاده می‌کنیم. معادله تحول ترموستات به‌صورت $\dot{\xi} = \frac{1}{M}\sum m\dot{y}_n^2 - NK_BT$ تعریف می‌شود که در این رابطه M ثابت ترموستات نوز - هوور است که مقدار آن $M = 1000$ و T دمای ترموستات و K_B 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، به‌طوری‌که $I_i - I_{i-1} = e\frac{dn_i}{dt} = -\frac{ie}{\hbar}[n_i, H]$ است. و I_i عملگر جریان موضعی متناظر 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 ازجمله تنش مکانیکی اعمال‌شده، بایاس الکتریکی اعمال‌شده، خواص نور، توالی جفت بازهای DNA و عوامل محیطی همچون دما می‌تواند 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].

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

[Downloaded from icml.ir on 2026-11-24]

جدول ۲: پارامترهای مورد استفاده در مدل PBD [۱۹و۲۰]

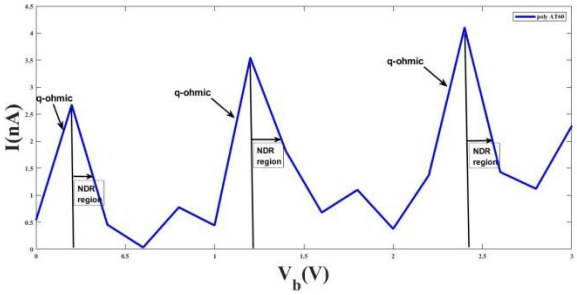
نماد	توصیف	واحد	مقدار
m	جرم جفت باز	amu	۳۰۰
a_{AT}	عرض پتانسیل مورس برای جفت پایه AT	A^{-1}	۴٫۵
a_{CG}	عرض پتانسیل مورس برای جفت پایه CG	A^{-1}	۶٫۹
D_{AT}	عمق پتانسیل مورس برای جفت پایه AT	eV	۰٫۰۵
D_{CG}	عمق پتانسیل مورس برای جفت پایه CG	eV	۰٫۰۷۵
κ	ثابت اتصال	eV/A^2	0.025
ρ	پارامتر پتانسیل توده ای		۰٫۵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

یافته ها

تاثیر میدان الکتریکی بر توالی‌ها

با ثابت‌گرفتن دامنه و فرکانس نیروی مکانیکی اعمالی و نور تابشی، تاثیر ولتاژ اعمالی را بر روی توالی‌ها را در دمای $T = 300\ K$ بررسی می‌کنیم. انتقال جریان در یک سیستم بیومولکولی ازطریق تغییر ولتاژ می‌تواند کنترل شود. در مطالعه اخیر تاثیر ولتاژ را بر رسانایی الکترکی ناشی از خاصیت پیزوالکتریک و تابش نور در قالب منحنی مشخصه جریان - ولتاژ بررسی می‌کنیم. به‌همین‌خاطر توالی‌های مورد نظر را به الکترودهایی با ولتاژ قابل تنظیم متصل می‌کنیم.

مولکول DNA رفتارهای متفاوتی در برابر تغییر ولتاژ اعمال‌شده، از خود نشان می دهد. همان‌طورکه در شکل ۲ مربوط به توالی AT با طول ۶۰ جفت باز مشاهده می‌شود، نواحی شبه‌اهمی 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 شبه‌اهمی در سیستم هستیم. با افزایش پتانسیل اعمالی شیب نمودار $I-V$ به منفی تغییر می‌کند. این پدیده را می‌توان به عنوان پدیده دیفرانسیلی منفی (NDR) بیان کرد[۲۱و۲۲]. دوباره با افزایش ولتاژ شاهد تکرار متناوب این نواحی هستیم. (شکل ۲). نواحی شبه‌اهمی و NDR قبلاً در نمودارهای مشخصه I-V در DNA مشاهده شده است [۲۳].



شکل ۲- نمودار مشخصه جریان-ولتاژ برای توالی $AT-60\ bp$

$F_0 = 0.01pN$ و $\omega_{Force} = 0.5THz$ و $A_0 = 0.2\frac{\hbar c}{ier_0}$ و $\omega_{ph} = 0.1THz$ T و zH و $= 300k$

تاثیر دامنه و فرکانس نیروی اعمالی بر توالی‌ها

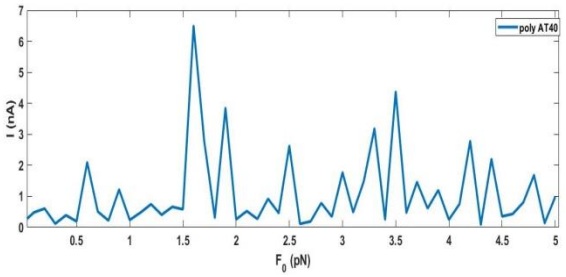
با ثابت‌گرفتن ولتاژ، دما، دامنه و فرکانس نور تابشی، ابتدا تاثیر شدت نیروی مکانیکی را بر توالی‌ها بررسی می‌کنیم، سپس تاثیر فرکانس نیروی اعمالی را بر توالی‌ها و تاثیر آن بر میزان جریان عبوری از توالی را مطالعه می‌کنیم. با توجه به ثابت‌گرفتن عوامل تاثیرگذار دیگر،

$V_b = cte$ و $\omega_{Force} = 0.5THz$ و $A_0 = 0.2\frac{\hbar c}{ier_0}$ و $\omega_{ph} = 0.1THz$ T و zH و $= 300k$

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

همان‌طورکه در شکل ۳ مشاهده می شود، جریان عبوری از توالی به‌صورت غیرخطی و شدیدا نوسانی است و با تغییر دامنه نیرو میزان جریان عبوری نیز تغییر می‌کند که نشان‌دهنده وجود خاصیت پیزوالکتریک در توالی $AT-40\ bp$ است. در این شرایط بیشترین جریان عبوری در دامنه $F_0 = 1.6pN$ اتفاق افتاد، که مقدار آن $6.5\ nA$ است.

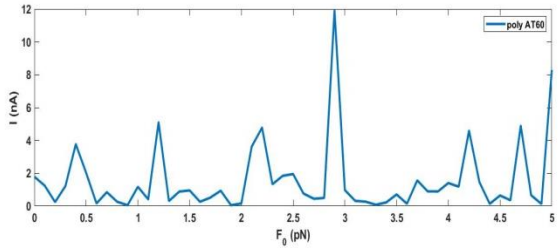
[Downloaded from icml.ir on 2026-11-24]



شکل ۳- نمودار جریان برحسب دامنه نیروی اعمالی

$$V_b = 4.8V, \omega_{Force} = 0.5THz, A_0 = 0.2\frac{\hbar c}{ier_0}, \omega_{ph} = 0.1THz, T = 300K$$

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. همان‌طورکه در شکل ٤ 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 $AT-60\ bp$ است. در این شرایط بیشترین جریان عبوری در دامنه $F_0 = 2.9pN$ اتفاق افتاد که مقدار آن $11.92nA$ است.

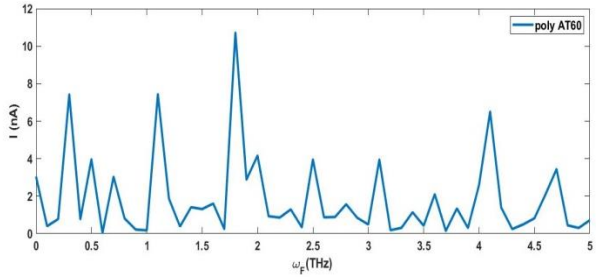


شکل ٤- نمودار جریان برحسب دامنه نیروی اعمالی

$$V_b = 2.4V, \omega_{Force} = 0.5THz, A_0 = 0.2\frac{\hbar c}{ier_0}, \omega_{ph} = 0.1THz, T = 300K$$

تاثیر فرکانس نیروی اعمالی بر توالی‌ها

فرکانس نیروی اعمالی را برای توالی‌ها از صفر تا ۵ تراهرتز (THz) تغییرداده و تاثیر آن را بر میزان و نحوه عبور جریان الکتریکی از طول توالی را بررسی کردیم. برای توالی AT با طول‌های ۶۰ جفت باز جریان عبوری را بررسی می کنیم. همان‌طورکه در شکل ۵ مشاهده می‌کنیم، جریان عبوری از توالی به صورت غیرخطی است و با تغییر فرکانس نیرو میزان جریان عبوری نیز تغییر می‌کند، که نشان‌دهنده وجود خاصیت پیزوالکتریک در این توالی‌هاست. بیشترین جریان عبوری از توالی $AT-60\ bp$ در فرکانس $\omega_{Force} = 1.8\ THz$ اتفاق می افتد که مقدار آن $10.73nA$ است (شکل۵).



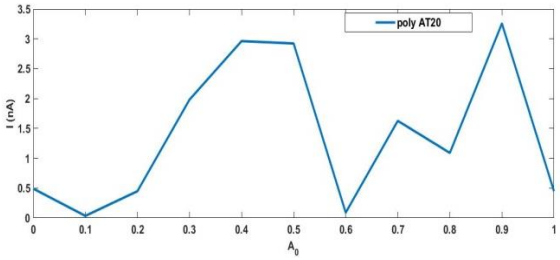
شکل ۵- نمودار جریان برحسب فرکانس نیروی اعمالی

$$V_b = 2.4V, F_0 = 2.9pN, A_0 = 0.2\frac{\hbar c}{ier_0}, \omega_{ph} = 0.1THz, T = 300K$$

تاثیر دامنه نور تابشی 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 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 $A_0 = 0.5\frac{\hbar c}{ier_0}$ و $A_0 = 0.9\frac{\hbar c}{ier_0}$ جریان قابل توجهی عبور می‌کند که می توان از این شرایط به عنوان آشکارساز استفاده کرد و بیشترین مقدار جریان نیز در $A_0 = 0.9\frac{\hbar c}{ier_0}$ و مقدار آن $3.26\ nA$ است.

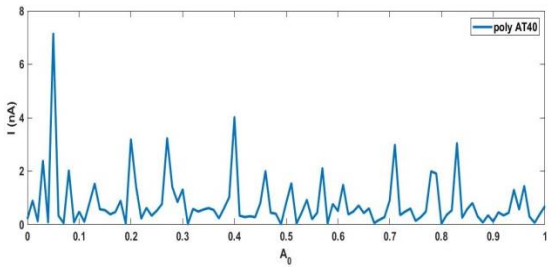
[Downloaded from icml.ir on 2026-11-24]



شکل ٦- نمودار جریان برحسب دامنه نور تابشی

$$V_b = 10V, F_0 = 2.2pN, \omega_{Force} = 0.8\frac{\hbar c}{ier_0}, \omega_{ph} = 0.1THz, T = 300K$$

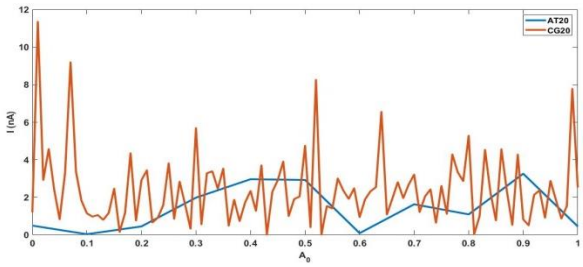
حال با ثاب‌گرفتن دیگر عوامل تاثیرگذار، دامنه نور تابشی را از صفر تا ۱ در واحد $\frac{\hbar c}{ier_0}$ تغییرداده و تاثیر آن را بر جریان عبوری از توالی AT با طول ۴۰ جت باز بررسی کردیم. با توجه به شکل ۷ که مربوط به توالی $AT-40\ bp$ است، مشاهده می‌کنیم که در چند نقطه جریان به حداکثر مقدار خود رسیده (پیک جریان) و دوباره به صفر می‌رسد. از این شرایط می‌توان به عنوان آشکارساز استفاده کرد. بیشترین مقدار جریان نیز در $A_0 = 0.05\frac{\hbar c}{ier_0}$ و مقدار آن $8.13\ nA$ است.



شکل ۷- نمودار جریان برحسب دامنه نور تابشی

$$V_b = 4.8V, F_0 = 1.6pN, \omega_{Force} = 0.7\frac{\hbar c}{ier_0}, \omega_{ph} = 0.1THz, T = 300K$$

حال تاثیر دامنه نور تابشی را برای دو توالی $AT-20\ bp$ و $CG-20\ bp$ مقایسه می‌کنیم. با توجه به شکل ۸ مشاهده می‌کنیم که جریان عبوری از توالی $CG-20\ bp$ دارای نوسانات شدید است ولی جریان عبوری از توالی $AT-20\ bp$ نوسانات آرام و کمتری دارد.

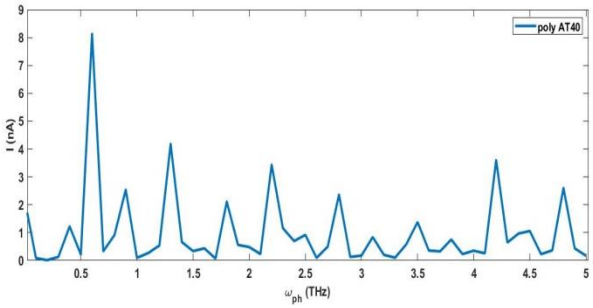


شکل ۸- نمودار مشخصه جریان-ولتاژ برای دو توالی $AT-20\ bp$ و $CG-20\ bp$

تاثیر فرکانس نور تابشی بر توالی‌ها

در این قسمت تاثیر فرکانس نور تابشی را برای توالی‌ها مورد بررسی قرار می‌دهیم. با ثابت‌گرفتن دیگر عوامل تاثیرگذار، فرکانس نور تابشی را از صفر تا ۵ تراهرتز (THz) تغییرداده و تاثیر آن را بر جریان عبوری از توالی بررسی می‌کنیم.

با توجه به شکل ۹ در توالی AT با طول ۴۰ جفت باز مشاهده می‌کنیم که $\omega_{Photon} = 0.6\ THz$ جریان قابل‌توجهی از توالی $AT-40\ bp$ عبور می‌کند که مقدار آن $8.13\ nA$ است.

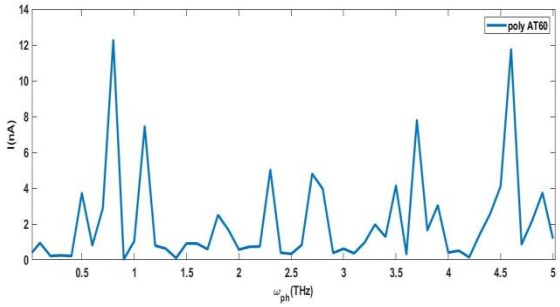


شکل ۹- نمودار جریان برحسب فرکانس نور تابشی

$$V_b = 4.8V, F_0 = 1.6pN, A_0 = 0.05\frac{\hbar c}{ier_0}, \omega_{Force} = 0.7THz, T = 300K$$

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

[Downloaded from icml.ir on 2026-11-24]



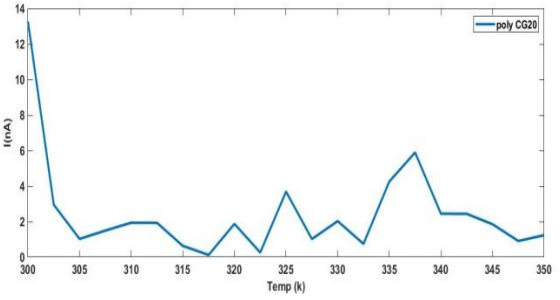
شکل ۱۰- نمودار جریان برحسب فرکانس نور تابشی

$$V_b = 2.4V, F_0 = 2.9pN, A_0 = 0.96\frac{\hbar c}{ier_0}, \omega_{Force} = 1.8THz, T = 300K$$

تاثیر دمای محیط

دمای محیط از عوامل تاثیرگذار در مطالعه خواص انتقال بار در DNA است. دمای محیط را به وسیله ترموستات می‌توان کنترل کرد. به عبارتی یک ترموستات دینامیک مولکولی، حمام حرارتی را به کل سیستم یا به بخشی از آن وصل می کند[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 می یابد به طوری که بیشترین جریان در دمای اتاق یعنی $300K$ عبور می‌کند که مقدار آن $13.27nA$ است.



شکل ۱۱- نمودار جریان برحسب دمای محیط

$$V_b = 0.4V, F_0 = 0.6pN, A_0 = 0.01\frac{\hbar c}{ier_0}, \omega_{Force} = 1.3THz, \omega_{ph} = 1.9THz$$

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 درنظرگرفتن اثرات دمای محیط بر DNA را به‌صورت 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 برمبنای 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 کنترل‌شده 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 فرودی را نشان می‌دهد. نوسان ناشی از نور می‌تواند به‌دلیل باز توزیع بار الکتریکی در نزدیکی اتصالات با الکترودها در پاسخ به محرک‌های خارجی باشد. در این مطالعه، یک طرح آشکارساز برای تابش تراهرتز 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 شناسایی‌شده در فواصل زمانی کوتاه شبه‌هارمونیک هستند و فرکانس آن با فرکانس بلوخ برای میدان الکتریکی یکنواخت مطابقت دارد. فرکانس بلوخ یک سیستم DNA در محدوده تراهرتز است. در نمودارهای مشخصه I-V، می‌توانیم رفتار NDR و رفتار شبه‌اهمی را مشاهده کنیم. NDR در مطالعات قبلی سوئیچ‌های مولکولی ظاهر شده است. اگر ولتاژ اعمال‌شده، 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، ازجمله تقویت‌کننده، مدارهای منطق، و حافظه، و همچنین سوئیچینگ سریع را پوشش می‌دهد. مکانیسم بروز NDR را می‌توان به‌صورت زیر توضیح داد: هنگامی که

[Downloaded from icml.ir on 2026-11-24]

یک ولتاژ بایاس به مولکول DNA اعمال می‌شود، در رژیم ترابرد غیرخطی، بار الکتریکی اضافی بدست می‌آید. این بار که در اوربیتال مولکولی تا حدی اشغال‌شده در سطح فرمی قرار دارد، سهم اصلی را در انتقال الکترون ازطریق مولکول DNA ایفا می‌کند. با افزایش ولتاژ بایاس، اوربیتال تا حدی اشغال‌شده بار بیشتری بدست می‌آورد و سهم الکترواستاتیکی در انرژی آن در ارتباط با پتانسیل الکتروشیمیایی الکترود منبع افزایش می‌یابد. اگر انرژی این اوربیتال مولکولی بسیار بالاتر از پتانسیل الکتروشیمیایی الکترود تخلیه باشد، شار الکترونی‌در جهت مثبت با افزایش ولتاژ بایاس به صفر نزدیک می‌شود، درحالی‌که شار الکترونی در جهت معکوس افزایش قابل‌توجهی ندارد. بنابراین، جریان خالص از طریق مولکولDNA اشباع می‌شود. علاوه‌براین، یک اغتشاش کوچک در مولکول DNA ازطریق تابش می‌تواند جابجایی های اتمی در مولکول DNA ایجاد کند، مانند طولانی‌شدن و تضعیف پیوندهای مولکولی خاص. ازاین‌رو، هم توزیع مجدد بار در نزدیکی اتصال‌ها با الکترودها و هم نور تابشی در وقوع NDR در سیستم ما شرکت می‌کنند. افزایش بیشتر ولتاژ بایاس منجربه آرایش فضایی بیشتر ساختار الکترونیکی سیستم و توزیع مجدد بارالکتریکی در نزدیکی اتصال‌ها می‌شود. این عامل باعث تغییر ساختار الکترونیکی بین مولکول و اتصال‌ها و درنتیجه باعث افزایش جریان می‌شود. بنابراین، پدیده NDR به‌طور متوالی در سیستم ظاهر می‌شود.

با تغییر دامنه نور تابشی شاهد نقاط دارای پیک جریان هستیم که از آن می توان 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 جریان عبوری از توالی‌ها را کنترل کرد. از رویکرد حاصل می‌توان برای طراحی و مهندسی ابزارهای پیزوفوتوترونیکی برای کاربرد در آشکارساها و حسگرها استفاده کرد.

[Downloaded from icml.ir on 2026-11-24]

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., & Ziaei, 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.

[Downloaded from icml.ir on 2026-11-24]