

اثر پیزواسپینترونیک در زنجیره مولکولی DNA تحت تابش نور لیزر

چکیده

مقدمه: دانش اسپینترونیک توانایی تزریق، تشخیص و دستکاری اسپین الکترون به سیستم‌های حالت جامد می‌باشد. در سال‌های گذشته تلاش‌های زیادی برای تولید سیستم‌های اسپینترونیک در مقیاس نانو براساس مواد مولکولی شده است. دستگاه‌های اسپینترونیک مولکولی می‌توانند درجه‌های اسپین آینده و دستگاه محاسباتی کوانتومی را تولید کنند. اخیراً انتشار جریان خالص اسپینی توسط تغییر شکل‌های مکانیکی تحت عنوان اثر پیزواسپینترونیک، توجه دانشمندان زیادی را به خود جلب کرده است. این اثر به دلیل اندرکنش اسپین - مدار ناشی از فشار (تنش) بوجود می‌آید. ما در این کار نشان می‌دهیم که جریان قطبیده اسپینی می‌تواند توسط اثر پیزواسپینترونیک در اتصالات مولکولی زنجیره DNA تولید شود.

روش بررسی: یکی از مهمترین کاربردهای فناوری لیزرها در پزشکی بوده است. این مقاله با هدف بررسی جریان اسپینی بر روی زنجیره مولکول DNA می‌پردازد، چون سیستم مورد مطالعه یک ماده بیولوژیک می‌باشد، در این راستا برای اعمال حمام حرارتی و دما بر روی سیستم از تابش لیزر استفاده شده است. همچنین از یک رویکرد هامیلتونی مبتنی بر مدل محدودکننده اتصال همراه با درجه آزادی اسپین مورد بررسی قرار گرفته است و به منظور اعمال تنش مکانیکی به سیستم، ثابت جهش الکترون و انرژی در سایت، از طریق پارامتر تنش تصحیح گردیده است.

یافته‌ها: سری زمانی جریان اسپینی در حضور و عدم حضور تنش مکانیکی، نقش بالقوه این پارامتر در جریان اسپینی را نشان می‌دهد. نمودار جریان اسپینی بر حسب ولتاژ، نواحی شبه‌اهمیک و مقاومت دیفرانسیلی منفی وابسته به اسپین در سیستم را مشخص می‌کند.

نتیجه‌گیری: در مطالعه حاضر ما یک مدل نظری برای کنترل جریان اسپین در DNA براساس اتصال بین اعوجاج‌های مکانیکی و درجه آزادی اسپین ارائه داده‌ایم. با توجه به معادلات تکاملی سیستم در حضور تنش و جریان اسپینی بدست آمده ما سعی کرده‌ایم دستگاه پیزواسپینترونیک مبتنی بر DNA را رسم کنیم.

واژه‌های کلیدی: اثر پیزواسپینترونیک، اثر اسپینترونیک، اثر پیزوالکتریک، تابش لیزر، سیستم‌های زیستی.

معصومه قراگوزی^۱

سمیرا فتحی‌زاده*^۲

فاطمه نعمتی^۳

- ۱- کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران
- ۲- استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران
- ۳- دانشجوی دکتری، گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران

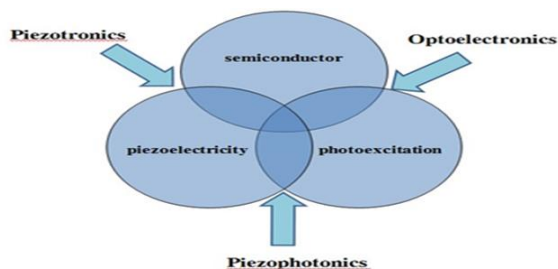
نویسنده مسئول: سمیرا فتحی‌زاده

پست الکترونیکی:

s.fathizadeh@sci.uut.ac.ir

۰۹۱۴۳۹۱۳۴۹۳

شماره تماس:



شکل ۱: پدیده‌های مختلف متأثر از تنش مکانیکی

مولکول DNA یا دنوکسی ریبونوکلیک اسید به عنوان یک نانوساختار و ماده‌ای که دارای خاصیت پیزوالکتریک می‌باشد، در این مطالعه مورد استفاده قرار می‌گیرد. این مولکول از یک مارپیچ دورشته‌ای تشکیل شده، که هر رشته از آن شامل مجموعه پلیمری از نوکلئوتیدها می‌باشد و هر نوکلئوتید متشکل از سه قسمت قند، بازهای آلی و گروه فسفات است [۶]. این مولکول دارای خاصیت عدم تقارن آینه‌ای می‌باشد به همین علت کایرال نامیده می‌شود و همچنین می‌تواند خاصیت رسانایی، نارسانایی و نیمه‌رسانایی از خود نشان دهد. مولکول‌های آلی کایرال، کاندیداهای مناسبی برای انتقال اطلاعات کدگذاری شده در اسپین و منبع جریان قطبیده اسپینی می‌باشند [۷].

در سال ۱۹۱۷، آلبرت اینشتین با توضیح تقویت‌کننده فتوالکتریک، پایه و اساس اختراع لیزر را بنیان گذاشت و در سال ۱۹۵۹ به عموم معرفی شد. سپس تئودور میمن درخشش یک چراغ فلش را در میله‌ای از یاقوت مصنوعی بررسی کرد و اولین لیزر ساخت بشر را در سال ۱۹۶۰ ایجاد کرد. از زمان کشف تاکنون لیزرها به طور گسترده مورد بررسی قرار گرفته‌اند. نور لیزر را می‌توان با دقت بالایی تحت کنترل درآورد و به صورت باریکه مداومی به نام لیزر پیوسته یا انفجارهای سریعی به نام لیزر پالسی استفاده نمود [۸]. برخلاف نور معمولی نور لیزر دارای انرژی کاملاً هماهنگی است که به این واسطه قدرت زیادی برای انجام کارهای مختلف در آن ایجاد می‌شود. نور لیزر نوری منسجم، تک رنگ، کنترل‌شده دقیقاً هدایت‌شده و با شدت بالا است که با نور معمولی متفاوت بوده و خصوصیات منحصر به فردش باعث شده از آن در

مقدمه

مواد چند منظوره در سال‌های اخیر، به خاطر داشتن طبیعت بیولوژیکی ذاتی و خصوصیات پیزوالکتریک^۱ مورد توجه بسیاری قرار گرفته است. مواد زیستی پیزوالکتریک نیز به عنوان کاندیداهای مناسبی برای تجهیزات کاربردی در سیستم‌های زیست پزشکی و نانوساختارهای پیچیده در نظر گرفته می‌شوند. نانوساختارهای پیچیده با قابلیت ساختاری بالا به عنوان سازه‌ای مناسب در توسعه سریع علم نانو و فناوری نانو مورد استفاده قرار می‌گیرند [۱].

واژه پیزو در پیزوالکتریک از زبان یونانی گرفته شده است که به معنای اعمال فشار می‌باشد. پیزوالکتریک، یک خاصیت قطبش الکتریکی ناشی از فشار ماکروسکوپی، جفت‌شدگی بین رفتارهای الکتریکی و مکانیکی است، که اجازه می‌دهد انرژی الکتریکی به مکانیکی و بالعکس تبدیل شود. در شکل (۱) رابطه بین پدیده‌های مختلف فیزیکی که مرتبط با اعمال فشار و استرس هستند نشان داده شده است [۲]. این پدیده در سال ۱۸۸۰ توسط ژاک و پیرکوری کشف شد. مواد زیستی پیزوالکتریک به دلیل سازگاری با طبیعت، تهیه آسان و غیرسمی بودن دوست‌دار محیط‌زیست در نظر گرفته می‌شوند [۳]. پیزوترونیک اساس دستگاه‌های مبتنی بر اصطلاح پیزوپتانسیل هستند. این پدیده یک رابط مستقیم بین دستگاه‌های میکرونانو الکترونیکی و محرک‌های مکانیکی می‌باشد که به طور گسترده در دستگاه‌های میکرونانو، مانند ترانزیستورها، دیودها، سلول‌های خورشیدی، دیودهای تابش نور و آشکارسازهای نوری استفاده شده است [۴]. اتصال بین نیمه‌هادی‌ها، تحریک نور و خاصیت پیزوالکتریک زمینه تحقیقاتی جدید دیگری را به نام پیزوفوتوترونیک ایجاد می‌کند، این اثر در سال ۲۰۱۰ توسط وانگ و همکاران ابداع شده است. در سال‌های اخیر، پیزوترونیک و پیزوفوتوترونیک در بهبود عملکرد دستگاه‌های الکترونیکی و انرژی الکترونیکی بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند [۵].

روش بررسی

از میان مدل‌های متفاوتی که برای توصیف انتقال بار الکتریکی در DNA مطرح شده است از جمله مدل‌های SSH، PBH و ...، ما مدل پیرارد، بیشاپ، هولشتاین (PBH) تعمیم‌یافته نسبت به درجه آزادی اسپین را برای بررسی خواص نانوسیم‌های DNA در نظر گرفته‌ایم. به علت غیرخطی بودن دینامیک سیستم، از ابزار آشوب برای بررسی اثر پیرواسپینترونیک بر روی DNA استفاده می‌کنیم. در مدل پیرارد، بیشاپ، هولشتاین 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 که هر سایت نشان‌دهنده یک جفت باز می‌باشد [۱۷]. در این پژوهش هامیلتونی کل سیستم به صورت رابطه زیر نوشته می‌شود:

$$H = H_{DNA} + H_{SO} + H_{lead} + H_{DNA-lead} + H_{Bath} + H_{DNA-Bath} + H_{field} \quad (1)$$

در رابطه بالا جمله اول هامیلتونی مربوط به مولکول DNA است که به صورت رابطه زیر بیان می‌شود:

$$H_{DNA} = \sum_{i,j} \sum_{\sigma} [\varepsilon_{i,j} c_{i,j}^{\sigma\dagger} c_{i,j}^{\sigma} + t_{i,i+1} c_{i,j}^{\sigma\dagger} c_{i+1,j}^{\sigma} + H. c.] + \sum_i \sum_{\sigma} (\lambda c_{i,i}^{\sigma\dagger} c_{i,i}^{\sigma} + H. c.) \quad (2)$$

که در آن t_{so} ثابت برهمکنش اسپین - مدار، θ زاویه مارپیچ، i و j به ترتیب نشان‌دهنده تعداد سایت‌ها و رشته‌ها می‌باشند. همچنین در این رابطه ε انرژی الکترون، $c_{i,j}^{\dagger}$ و $c_{i,j}$ به ترتیب عملگرهای خلق و نابودی الکترون در سایت (i, j) می‌باشند و λ اندرکنش بین زنجیره‌ای می‌باشد.

جمله دوم در رابطه (۱) هامیلتونی اسپین - مدار راشباگونه می‌باشد که با استفاده از عملگرهای خلق و نابودی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$(3)$$

کاربردهای مختلف از جمله پزشکی استفاده شود [۹]. با توجه به اینکه در این مقاله سیستم مورد مطالعه ما یک سیستم بیولوژیک می‌باشد، در این راستا ما سعی کرده‌ایم از تابش نور لیزر بر مولکول DNA، در غالب حمام حرارتی اعمالی به سیستم بهره بگیریم.

قبلاً نشان داده شده است که با استفاده از خواص منحصر به فرد نیمه‌هادی‌ها و مواد اسپینترونیک مولکولی، مانند انعطاف‌پذیری مکانیکی [۱۰]، خاصیت فوتوالکتریک [۱۱]، ویژگی فروالکتریک [۱۲]، و برهم‌کنش تبادل مغناطیسی در اسپینترونیک مولکولی، مسیری قابل توجه و امیدوارکننده برای ارتقاء پیشرفت در اسپینترونیک وجود دارد [۱۳]. با ادغام ویژگی‌های اسپینی و اپتوالکتریکی مولکول‌ها می‌توان به کاربرد بسیار بالقوه‌ای در دیود آلی تابش نور اسپینی [۱۰] و دستگاه فتوولتائیک اسپین - مولکولی دست یافت. ما خواص پیرو اسپینترونیک یک زنجیره DNA را به عنوان یک سیستم مولکولی مطالعه می‌کنیم. ویژگی‌های توپولوژیکی هندسه DNA توجه زیادی را به خود جلب کرده است. مولکول‌های DNA دورشته‌ای (dsDNA) کایرالیتته منحصر به فردی دارند. در سال ۲۰۱۱ دانشمندان کشف کردند که انتقال الکترون از طریق مولکول‌های کایرال به جهت اسپین الکترون بستگی دارد. از اسپین الکترون می‌توان برای رمزگذاری، ذخیره‌سازی و انتقال اطلاعات استفاده کرد [۱۴]. در پدیده اسپینترونیک که علم ترکیب اسپین الکترون با الکترونیک می‌باشد، جریان‌های اسپین بالا و اسپین پایین می‌تواند از طریق DNA جریان یابد. اثرات خارجی مانند میدان الکتریکی و مغناطیسی، دما و تغییرات توالی در قطبش اسپین نقش به‌سزایی دارند [۱۵].

در این پژوهش بروز اثر پیرواسپینترونیک^۱ بر روی DNA مورد مطالعه قرار می‌گیرد. این اثر برای تولید جریان اسپینی، براساس جفت‌شدگی اثرات مکانیکی و درجه آزادی اسپین است که برخلاف اثرات پیروالکتریک و پیرومغناطیس پدیده‌ای محدود به حضور همزمان سیستم‌هایی با ویژگی معکوس زمان (T)، وارونگی (I) و شکست تقارن می‌باشد [۱۶].

در این رابطه عبارت t_i مربوط به عناصر ماتریس تونل زنی است، در روابط اخیر عبارت H.C. برای تاثیر مزدوج هرمیتی وارد شده است.

جمله آخر در رابطه (۱)، H_{fields} هامیلتونی های مربوط به میدان های الکتریکی و مغناطیسی می باشد که به ترتیب به صورت روابط زیر نوشته می شوند:

$$H_E = -e \sum_{n, \sigma=\uparrow, \downarrow} Ed \cos[(n - 1)\Delta\phi] C_n^{\sigma\dagger} C_n^\sigma \quad (7)$$

$$H_B = \sum_n (-\mu_B B C_n^{\uparrow\dagger} C_n^\uparrow + \mu_B B C_n^{\downarrow\dagger} C_n^\downarrow) \quad (8)$$

به منظور اعمال تنش مکانیکی بر سیستم، ثابت جهش الکترون و انرژی در سایت از طریق پارامتر تنش به صورت روابط (۹) و (۱۰) تصحیح می شود [۱۸-۱۹-۲۱-۲۰].

$$\varepsilon_n' = \varepsilon_n + \frac{er \left(1 - \sigma \frac{S_1}{1.0}\right)}{L \left(1 + \frac{S_1}{1.0}\right)} \tan \alpha V_{sd} \cos \left(\frac{\gamma}{1.0}\right) + \varphi. \quad (9)$$

$$V_{n'+1} = V_{n+1} e^{\left(1 + \frac{S_1}{1.0}\right)} \quad (10)$$

که در آن $r=10$ شعاع DNA، α زاویه شیب DNA، و ولتاژ منبع، $\sigma = -0.5$ نرخ پواسونی و S_1 تنش طولی اعمال شده به DNA است.

در مطالعه حاضر معادلات مربوط به جریان های الکتریکی با اسپین بالا و پایین را با استفاده از معادله هایزبرگ $\hat{C}_n^\sigma = -\frac{i}{\hbar} [C_n^\sigma, H]$

به ترتیب به صورت روابط زیر استخراج شد:

$$H_{so} = \sum_n \left[\gamma t_{so} \cos \theta (C_n^{\uparrow\dagger} C_{n+1}^\uparrow - C_n^{\uparrow\dagger} C_{n-1}^\uparrow - C_n^{\downarrow\dagger} C_{n+1}^\downarrow + C_n^{\downarrow\dagger} C_{n-1}^\downarrow) + D_{n,n+1} C_n^{\uparrow\dagger} C_{n+1}^\uparrow - D_{n,n+1}^* C_n^{\downarrow\dagger} C_{n+1}^\downarrow + D_{n-1,n}^* C_n^{\uparrow\dagger} C_{n-1}^\uparrow - D_{n-1,n} C_n^{\downarrow\dagger} C_{n-1}^\downarrow \right]$$

جمله سوم در رابطه (۱) هامیلتونی مربوط به الکترونها می باشد که به صورت رابطه زیر نوشته می شود:

$$H_{lead} = \sum_{j=1,2} \sum_{k,\sigma} \left(\varepsilon_{L,j,k} + \frac{eV_b}{\gamma} \right) a_{L,j,k}^{+\sigma} a_{L,j,k}^\sigma + \sum_{j=1,2} \sum_{k,\sigma} \left(\varepsilon_{R,j,k} - \frac{eV_b}{\gamma} \right) a_{R,j,k}^{+\sigma} a_{R,j,k}^\sigma \quad (4)$$

در این رابطه ولتاژ بایاس می باشد که به سیستم اعمال می شود و $a_{\beta,j,k}^+$ ، $a_{\beta,j,k}^\sigma$ به ترتیب عملگرهای خلق و نابودی الکترون در الکتروده $\beta = R, L$ می باشند. همچنین هامیلتونی مربوط به برهمکنش مولکول DNA با الکترونها به صورت زیر نوشته می شود:

$$H_{DNA-lead} = \sum_{j=1,2} \sum_{k,\sigma=\uparrow,\downarrow} (t_L a_{L,j,k}^{+\sigma} c_{j,1}^\sigma + t_R a_{R,j,k}^{+\sigma} a_{j,N}^\sigma + H.c.) \quad (5)$$

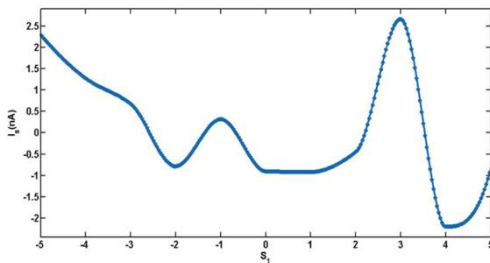
هامیلتونی مربوط به حمام حرارتی در رابطه (۱) به صورت زیر تعریف می شود:

$$H_{Bath} = \sum_{i=1}^N \hbar \omega_i b_i^+ b_i + \gamma \sum_{i=1}^{N-1} \hbar \Omega_i (b_i^+ b_{i+1} + b_{i+1}^+ b_i) + H.c. \quad (6)$$

که در آن b_i^+ و b_i عملگرهای خلق و نابودی نوسانگر در سایت i ام می باشند، Ω ثابت جفت شدگی متقابل و ω فرکانس نوسانگر در سایت می باشد. هامیلتونی مربوط به برهمکنش مولکول DNA با حمام حرارتی به صورت رابطه زیر تعریف می گردد:

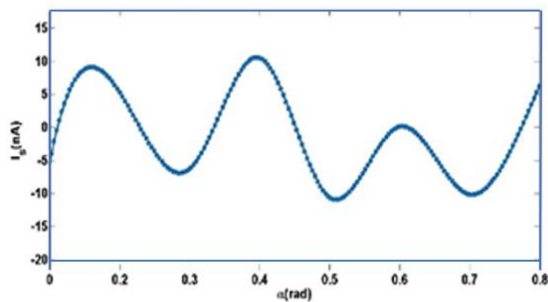
$$H_{DNA-Bath} = \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{j=1,2} t_i b_i^+ c_{i,j}^\sigma + H.c. \quad (7)$$

در راستای تحلیل سیستم در حضور تنش مکانیکی، جریان اسپینی برحسب محدوده اعمال تنش (تنش منفی به معنای فشرده شدن DNA می‌باشد و تنش مثبت به معنای کشیدگی مولکول DNA می‌باشد) برای سیستم رسم شده است (شکل ۳). همان‌طور که در شکل مشخص است در مقدار $S_1 = 3.4$ شاهد ماکزیمم مقدار جریان اسپینی هستیم و در مقدار $S_1 = -3$ شاهد جریان اسپینی کمتری در سیستم می‌باشیم. با توجه به شکل در تنش‌های منفی جریان اسپینی نسبتاً ثابت و در تنش‌های مثبت شاهد نوسانات شدیدتر، غیرخطی و تقریباً پریودیک در سیستم هستیم.



شکل ۳: نمودار جریان اسپینی بر حسب تنش مکانیکی

همچنین به منظور تحلیل سیستم بر مبنای پارامتر کنترل α (زاویه پیچش)، جریان اسپینی برحسب پارامتر α رسم شد و همان‌طور که از شکل (۴) مشخص است، در $\alpha=0.4$ شاهد پیک بالایی برای جریان اسپینی هستیم.



شکل ۴: جریان اسپینی بر حسب پارامتر کنترل α

با در نظر گرفتن پارامترهای $\alpha=0.4$ و $S_1 = 4$ ، که مطابق نتایج

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

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

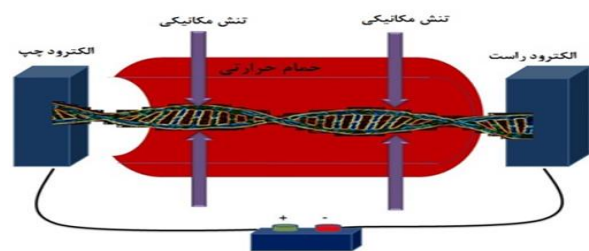
یافته‌ها

ما در این پژوهش درباره تولید و ایجاد جریان اسپینی خالص و انتقال اسپین از توالی مولکول DNA، به‌خصوص توالی CH22 براساس هامیلتونی رابطه (۱) می‌پردازیم. ما مطابق شکل (۲) سیستم مورد نظر خود را طراحی کردیم، همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود زنجیره مولکول DNA توسط حمام حرارتی (دمای ناشی از تابش نور لیزر) احاطه شده است، که ما در این کار برای وارد کردن اثر حمام یا دما در حالت نیمه‌کلاسیک از ترموستات نوز - هورر استفاده کرده‌ایم. ترموستات نوز - هورر یک روش دقیق و پرکاربرد برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی DNA، می‌باشد که معادله تحول آن به صورت رابطه زیر نوشته می‌شود:

$$\xi = \frac{1}{M} (\sum_n m \dot{y}^2 - N K_B T) \quad (13)$$

($N K_B T$)

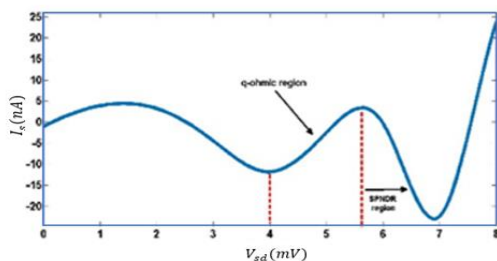
در رابطه فوق ξ ضریب میرایی، T_0 دمای سیستم، K_B ثابت بولتزمن و $M = 1000$ ثابت ترموستات می‌باشد [۲۲].



شکل ۲: توصیف شماتیک از سیستم DNA که متصل به الکترودهای فلزی از دو انتهای راست و چپ بوده و در یک حمام حرارتی (دمای ناشی از تابش نور لیزر) غوطه‌ور است و تحت تاثیر تنش مکانیکی قرار گرفته است.

شکل ۶: نمودار تاثیر همزمان تنش مکانیکی و زاویه پیچش DNA بر روی جریان اسپینی

با بررسی تغییرات جریان اسپینی نسبت به اختلاف پتانسیل الکتریکی دو سر سیستم شاهد رفتارهای متفاوتی از سیستم هستیم (شکل ۷). با افزایش ولتاژ در مناطقی شاهد افزایش جریان اسپینی و در محدوده‌ای با افزایش ولتاژ شاهد کاهش جریان می‌باشیم. به مناطقی که با افزایش ولتاژ، شاهد افزایش جریان هستیم، مناطق شبه اهمیک نامیده می‌شوند و به مناطقی که در آنها با افزایش ولتاژ، جریان اسپینی کاهش می‌یابد شاهد پدیده مقاومت دیفرانسیلی منفی وابسته به اسپین (SPNDR) هستیم. این پدیده قبلاً نیز در جریان‌های اسپینی عبوری از مولکول DNA مشاهده شده است که ویژگی‌های ذاتی و قابل تغییر این اثر برای طراحی دستگاه‌های اسپینترونیک، انتقال و پردازش اطلاعات در آینده مهم می‌باشد [۲۳].

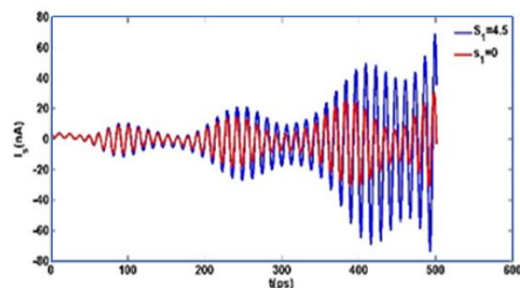


شکل ۷: جریان اسپینی بر حسب ولتاژ

بحث و نتیجه گیری

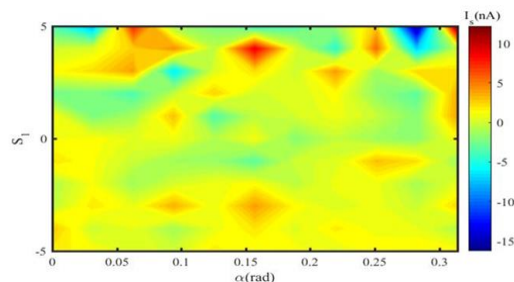
از آنجا که در سال‌های اخیر جریان اسپینی در تئوری انتقال امن اطلاعات مورد استفاده محققان بسیاری قرار گرفته است و اخیراً تعدادی از آزمایش‌های پیشگام و کارهای نظری نشان می‌دهد که مواد آلی می‌توانند عملکردهای مشابه و شاید برتری در ساخت دستگاه‌های اسپینی نسبت به فلزات غیرآلی معمولی و نیمه‌هادی‌ها داشته باشند. در این راستا ما در این مقاله عبور جریان اسپینی از نانوسیم‌های DNA در حضور تابش لیزر در قالب حمام حرارتی، تنش مکانیکی اعمالی و متصل به الکترودها از دو انتها را مورد

قبلی بیشترین جریان اسپینی در این مقادیر پارامترها از سیستم عبور می‌کرد، سری زمانی جریان اسپینی برای سیستم در شکل (۵) رسم شد، همان‌طور که در شکل مشاهده می‌کنید خطوط آبی، جریان اسپینی عبوری سیستم در حضور تنش مکانیکی و خطوط قرمز جریان اسپینی در غیاب تنش مکانیکی را نشان می‌دهد، با توجه به شکل جریان اسپینی عبوری به سیستم با اعمال تنش به سیستم افزایش می‌یابد.



شکل ۵: سری زمانی جریان اسپینی برای توالی CH22 در حضور و عدم حضور تنش مکانیکی

در شکل (۶) تاثیر همزمان تنش مکانیکی و زاویه پیچش DNA بر روی جریان اسپینی عبوری از توالی CH22 بررسی می‌شود. در این نمودار شاهد شکل‌گیری محدوده‌های جزیره ماندی بودیم که در آن تاثیر همزمان تنش مکانیکی و زاویه پیچش منجر به عبور ماکزیمم مقدار و مینیمم مقدار جریان اسپینی می‌باشد. با توجه به شکل تا زمانی که تنش مکانیکی صفر یا منفی می‌باشد جریان قابل توجهی از سیستم عبور نمی‌کند، ولی با افزایش زاویه پیچش و اعمال تنش مکانیکی ۳ و بیشتر، شاهد افزایش جریان خالص اسپینی می‌باشیم، به گونه‌ای که در $S_1 = 0$ و $\alpha = 0.27(\text{rad})$ ماکزیمم جریان اسپینی از سیستم عبور می‌کند.



بررسی قرار دادیم و نشان داده شد که مولکول DNA برای ایجاد یک پاسخ پیزواسپینترونیک خالص و محاسبه آن شرایط را فراهم می‌کند. برای دستیابی به جریان‌های انتخابی اسپین بالا در ساختارهای ماریچ و افزایش اثر CISS، راه‌های مختلفی مانند اعمال ولتاژ خارجی پیشنهاد شده است [۲۴]. ما خواص انتقال اسپین DNA را از طریق جفت‌شدگی خواص مغناطیسی و الکتریکی، اثر مگنتوالکتریک (ME)، کنترل کرده‌ایم. اندرکنش اسپین - مدار را می‌توان با ولتاژ گیت تنظیم کرد [۲۵]. از سوی دیگر، پتانسیل الکتریکی اعمال شده در امتداد ماریچ DNA می‌تواند یک میدان الکتریکی خارجی در طول زنجیره ایجاد کند (اثر استارک). همچنین، آزمایش‌ها نشان داده‌اند که تقارن برگشت زمان با اعمال یک بایاس خارجی شکسته می‌شود. بنابراین، جفت‌شدن جهت انتقال الکترون با جهت اسپین باعث فیلتر اسپین تحت بایاس می‌شود. بنابراین، جهت بایاس قطبش اسپین الکترون را تعیین می‌کند [۲۶]. ما به صورت تئوری اثر ولتاژ و تنش مکانیکی را بر فیلتر اسپینی سیستم مولکولی خود تعیین کرده‌ایم. مغناطیس کنترل شده با ولتاژ را می‌توان از طریق جفت‌شدگی با تنش محقق کرد. اثر ME ناشی از تنش، یک استراتژی مهم برای دستگاه‌های اسپینترونیک کنترل شده با ولتاژ است [۲۷-۲۸]. بنابراین، می‌توان نانو ساختار جدید پیزواسپینترونیک را براساس توالی DNA طراحی و کنترل کرد.

References:

1. Yuan, H., Lei, T., Qin, Y., He, J. H., Yang, R. Design and application of piezoelectric biomaterials. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2019; 52(19), 194002.
2. Syed, N., Zavabeti, A., Ou, J. Z., Mohiuddin, M., Pillai, N., Carey, B. J., Zhang B.Y., Datta, R.S., Jannat, A., Haque, F. Messalea, K. A. Printing two-dimensional gallium phosphate out of liquid metal. *Nature Communications*, 2018; 9(1), 1-10.
3. Cui, C., Xue, F., Hu, W. J., Li, L. J. Two-dimensional materials with piezoelectric and ferroelectric functionalities. *npj 2D Materials and Applications*, 2018; 2(1), 1-14.
4. Wang, L., Liu, S., Zhang, Z., Feng, X., Zhu, L., Guo, H., Ding, W., Chen, L., Qin, Y., Wang, Z. L. 2D piezotronics in atomically thin zinc oxide sheets: Interfacing gating and channel width gating. *Nano Energy*, 2019; 60, ۷۲۴-۷۳۳.
5. Purusothaman, Y., Alluri, N. R., Chandrasekhar, A., Venkateswaran, V., Kim, S. J. Piezophotonic gated optofluidic logic computations empowering intrinsic reconfigurable switches. *Nature Communications*, 2019; 10(1), 1-9.
6. Yakushevich, L. V. *Nonlinear physics of DNA*. John Wiley & Sons, 2006.
7. Behnia, S., Fathizadeh, S., Akhshani, A. DNA spintronics: Charge and spin dynamics in DNA wires. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2016; 120(5), 2973-2983.
8. Luke, A. M., Mathew, S., Altawash, M. M., Madan, B. M. Lasers: A review with their applications in oral medicine. *Journal of Lasers in Medical Sciences*, 2019; 10(4), 324.
9. Garrett, N. L. *Introduction to Physics in Modern Medicine*, 2nd edn., by Suzanne Amador Kane, 2011.
10. Sun, X., Bedoya-Pinto, A., Llopis, R., Casanova, F., Hueso, L. E. Flexible semitransparent organic spin valve based on bathocuproine. *Appl. Phys. Lett.* 2014; 105(8), 134-141.
11. Nguyen, T. D, Ehrenfreund, E., Vardeny, Z. V. Spin-polarized light-emitting diode based on an organic bipolar spin valve. *Science* 2012, 337(6091), 204-209.
12. Sun, D., Fang, M., Xu, X., Jiang, L., Guo, H., Wang, Y., Yang, W., Yin, L., Snijders, P. C., Ward, T. Z., Gai, Z. Active control of magnetoresistance of organic spin valves using ferroelectricity. *Nat. Commun.* 2014, 5(1), 1-6.
13. Raman, K. V., Kamerbeek, A. M., Mukherjee, A., Atodiresei, N., Sen, T. K., Lazić, P., Caciuc, V., Michel, R., Stalke, D., Mandal, S. K., Blügel, S. Interface-engineered templates for molecular spin memory devices. *Nature* 2013, 493(7433), 509-513.
14. Yang, K., Chen, H., Pope, T., Hu, Y., Liu, L., Wang, D, Tao, L., Xiao, W., Fei, X., Zhang, Y. Y., Luo, H. G. Tunable giant magnetoresistance in a single-molecule junction. *Nature Communications*, 2019; 10(1), 1-7.
15. Raman, K. V., Kamerbeek, A. M., Mukherjee, A., Atodiresei, N., Sen, T. K., Lazić, P., Caciuc, V, Michel, R., Stalke, D., Mandal, S. K., Blügel, S. Interface-engineered templates for molecular spin memory devices. *Nature*, ۲۰۱۳; ۴۹۳(۷۴۳۳), ۵۰۹-۵۱۳.
16. Ulloa, C, Troncoso, R. E., Bender, S. A., Duine, R. A, Nunez, A. S. Piezospintronic effect in honeycomb antiferromagnets. *Physical Review B*, 2017; 96(10), 104419.
17. Holstein, T. Studies of polaron motion: Part I. The molecular-crystal model. *Annals of Physics*, 1959; 8(3), 325-342.
18. Willoughby, A., Capper, P., Kasap, S. *Spintronics for next generation innovative devices*. John Wiley & Sons, 2015.

19. Tassi, M., Morphis, A., Lambropoulos, K., Simserides, C. RT-TDDFT study of hole oscillations in B-DNA monomers and dimers. *Cogent Physics*, 2017; 4(1), 1361077.
20. Lambropoulos, K., Kaklamanis, K., Georgiadis, G., Simserides, C. THz and above THz electron or hole oscillations in DNA dimers and trimers. *Annalen der Physik*, 2014; 526(5-6), ۲۴۹-۲۵۸.
21. Lambropoulos, K., Kaklamanis, K., Morphis, A., Tassi, M., Lopp, R., Georgiadis, G., Theodorakou, M., Chatzieleftheriou, M., Simserides, C. Wire and extended ladder model predict THz oscillations in DNA monomers, dimers and trimers. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2016; 28(49), 495101.
22. Peyrard, M., Bishop, A. R. Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation. *Physical Review Letters*, 1989; 62(23):2755.
23. Joe, Y. S., Malakooti, S., Hedin, E. R. Controllable negative differential resistance on charge transport through strained and tilted DNA molecules. *International Journal of Modern Physics B*, 2019; 33(11), 1950099.
24. Guo, A. M., Sun, Q. F. Sequence-dependent spin-selective tunneling along double-stranded DNA. *Phys. Rev. B* 2012, 86, 115441.
25. Liang, D., Gao, X.P. Strong tuning of Rashba spin-orbit interaction in single InAs nanowires. *Nano Lett.* 2012, 12(6), 3263-3267.
26. Varela, S., Mujica, V., Medina, E. Effective spin-orbit couplings in an analytical tight-binding model of DNA: Spin filtering and chiral spin transport. *Phys. Rev. B* 2016, 93(15), 155436.
27. Biswas, A. K., Bandyopadhyay, S., Atulasimha, J. Complete Magnetization Reversal in a Magnetostrictive Nanomagnet with Voltage-Generated Stress: A Reliable Energy-Efficient Non-Volatile Magneto-Elastic Memory. *Appl. Phys. Lett.* 2014, 105(7), 072408.
28. Ghidini, M., Pellicelli, R., Prieto, J. L., Moya, X., Soussi, J., Briscoe, J., Dunn, S., Mathur, N. D. Non-Volatile Electrically-Driven Repeatable Magnetization Reversal with No Applied Magnetic Field. *Nat. Commun.* 2013, 4(1), 1453.