لیزر در پزشکی ۱۴۰۱/ دوره ۱۹ / شماره (۴) / صفحات ۱۶-۹.

مقاله پژوهشی

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

سمیرا فتحی‌زاده[۱،۲*]

۱. گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران

۲. پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره‌شناسی، دانشگاه تبریز، تبریز، ایران

نویسنده مسئول: سمیرا فتحی‌زاده

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

شماره تماس: ۰۴۴۳۱۹۸۰۲۲۹

چکیده

مقدمه: دانش اسپینترونیک در طول چند دهه گذشته به‌علت توسعه دستگاه‌های جدید که می‌تواند 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 می‌دهد. 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 انعطاف‌پذیری 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 می‌شود و سهم اندرکنش الکترون – فوتون با استفاده از مدل هولشتاین اضافه می‌شود. همچنین جفت‌شدگی الکترون – فوتون برای درنظر گرفتن اثرات نورتابشی در سیستم ملاحظه می‌شود. سپس با به‌دست‌آوردن معادلات تحول سیستم و محاسبه جریان‌های اسپینی، ترابرد اسپینی سیستم مطالعه می‌شود.

یافته‌ها: نتایج نشان می‌دهند با افزایش مقدار جفت‌شدگی الکترون – فوتون تغییرات فاحشی در جریان اسپینی عبوری از سیستم مشاهده می‌شود. از طرفی، جفت‌شدگی الکترون – فوتون نیز تاثیر بسزایی روی جریان اسپینی عبوری از سیستم دارد، به‌طوری‌که در مقدار جفت‌شدگی الکترون – فوتون پایین حتی با افزایش انرژی فوتون تغییر چندانی در جریان اسپینی مشاهده نمی‌شود اما زمانی‌که جفت‌شدگی الکترون – فوتون افزایش می‌یابد انرژی فوتون به‌عنوان یک فاکتور کلیدی عمل می‌کند که می‌تواند جریان اسپینی عبوری را کنترل کند. زمانی‌که انرژی فوتون به ۱ الکترون – ولت می‌رسد بیشترین جریان اسپینی از سیستم عبور می‌کند.

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.

واژه‌های کلیدی: اسپینترونیک، اپتوالکترونیک، دی‌ان‌ای، جفت‌شدگی الکترون – فوتون، جفت‌شدگی الکترون – فوتون

[Downloaded from icml.ir on 2025-11-04]

مقـدمه

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 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 اسیددئوکسی ریبونوکلئیک (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 می‌تواند 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 الکترون ازطریق مولکول‌های کایرال به جهت اسپین الکترون بستگی دارد و اخیراً نشان داده شده است که جابجائی بار در مولکول‌های کایرال، قطبی‌شدن گذار اسپین را ایجاد می‌کند. از اسپین الکترون می‌توان برای رمزگذاری و ذخیره‌سازی و انتقال اطلاعات استفاده کرد. علاوه‌بر موارد فوق، مطالعات بر روی خواص انتخابی اسپین از مولکول‌های 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 جریان الکترونی که از حامل‌های اسپین بالا و اسپین پایین تشکیل شده است، استفاده می‌کنند. این حامل‌ها، اطلاعات رمزگذاری‌شده در حالت اسپین خود را منتقل می‌کنند. جریان‌های مختلف مربوط به 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 بسزایی دارند. حساسیت ترابرد الکترون به نوسانات شبکه را می‌توان در جفت‌شدگی الکترون – فوتون ملاحظه کرد. اثر جفت‌شدگی الکترون – فوتون برای فرایند ترابرد الکترون در DNA در یک مدل بدون درنظر گرفتن اسپین الکترون بررسی شده است [۳]. در این کار، ما اثر جفت‌شدگی الکترون – فوتون را در کنار اثرات اسپین الکترون مطالعه می‌کنیم. جفت‌شدگی بین درجات آزادی الکترونی و ارتعاشی با یک فاکتور جفت‌شدگی توضیح داده می‌شود. در ترابرد الکتریکی DNA، این جفت‌شدگی در مضمون پلارون بیان می‌شود [۴]، به‌طوری‌که الکترون‌ها 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 کشیده‌شدن و چرخیدن پیوند هیدروژنی در DNA همراه است و شامل مدهای اپتیکی (نوسانات پایه) در مولکول می‌شود.

ازطرف‌دیگر، اندرکنش سیستم‌های زیستی با نور و طراحی ابزارهای اپتوالکتریکی برمبنای این مولکول‌ها 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 به‌عنوان 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 [۷]. خواص نوری یک سیستم زیستی می‌تواند بر کاربردهای تشخیصی و درمانی نور روی این سیستم‌ها نیز تأثیر بگذارد. برهمکنش نور می‌تواند عملگرهای مولکولی تنظیم‌شده با نور ایجاد کند [۸]. همچنین، انتقال بار الکتریکی با محرک نور می‌تواند 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 می‌توانند 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

[Downloaded from icml.ir on 2025-11-04]

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 برمبنای مولکول‌های زیستی و برای کاربرد در نانوحسگرهای زیستی پزشکی می باشد.

مدل و روش‌ها

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]. برهمکنش گرمایی ازجمله واکنش‌هایی است که هنگام تابش لیزر بر روی سیستم های زیستی ایجاد می‌شود و کاربرد بسزایی در لیزر پزشکی به‌ویژه در جراحی لیزری[1] 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 فونون‌های شبکه و فوتون‌های تابشی اقدام شود. در این مطالعه، مولکول DNA از چپ و راست به الکترودهای فلزی با پتانسیل V_{sd} متصل‌شده و در یک حمام گرمایی غوطه‌ور شده است. ترابرد الکتریکی وابسته به اسپین در یک زنجیره DNA با N جفت باز می‌تواند به‌صورت زیر ملاحظه شود:

به‌طوری‌که $H_{DNA} = H_{PBH} + H_{SO}$ شامل یک هامیلتونی مدل PBH[2] 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[3] به‌صورت زیر بیان می‌شود:

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

به‌طوری‌که m جرم کاهش‌یافته نوکلئوتیدها، n تعداد سایت‌ها، y_n جابجایی جفت بازها در امتداد پیوند هیدروژنی، $V(y_n) = D_n(e^{-a_n y_n} - 1)^2$ پتانسیل مورس برای توصیف جابجایی در راستای پیوندهای هیدروژنی و $W(y_n, y_{n+1}) = \frac{k}{2}(1 + \rho e^{-b(y_{n+1}+y_n)})(y_{n+1} - y_n)^2$ جمله اندرکنش بازها در راستای رشته DNA می‌باشد. D_n و a_n به ترتیب عمق و معکوس عرض چاه پتانسیل مورس هستند. ρ پارامتر بدون بعد برای مشخص‌کردن شدت اندرکنش غیرهارمونیک، b پارامتری همگن متناسب با معکوس طول برای تعریف اندرکنش غیرخطی بازهای مجاور و k ثابت اندرکنش بین بازهای مجاور است.

جمله الکترونی هامیلتونی PBH که با اثرات اسپینی تصحیح شده است به‌صورت زیر نوشته می شود:

$$H_e + H_{e-lat} = \sum_n \sum_\sigma [\varepsilon_n c_n^{\sigma+} c_n^\sigma + t_{n,n+1} c_n^{\sigma+} c_{n+1}^\sigma + H.c.] + \chi \sum_n \sum_\sigma y_n c_n^{\sigma+} c_n^\sigma \qquad (3)$$

که جمله اول، انتقال الکترون و جمله دوم، اندرکنش الکترون با شبکه DNA را نشان می‌دهد. $(c_n^\sigma)c_n^{\sigma+}$ عملگر خلق (فنا) یک الکترون با اسپین $\sigma = \uparrow\downarrow$، ε_n انرژی در سایت الکترون جفت باز n-ام و $t_{n,n+1}$ ثابت پرش الکترون بین جفت بازهای مجاور را نشان می‌دهد. انرژی‌های در سایت و ثابت‌های پرش الکترون بین جفت بازهای DNA در جدول ۱ نشان داده شده‌اند [۱۵]. مقادیر پارامترهای استفاده‌شده در مدل PBH نیز در جدول ۲ نوشته شده‌اند [۱۶و۱۳].

[1] Laser Surgery
[2] Peyrard−Bishop−Holstein
[3] Peyrard−Bishop−Dauxois

[Downloaded from icml.ir on 2025-11-04]

جدول ۱: انرژی‌های در سایت برای جفت بازهای مختلف و ثابت های پرش بین جفت بازهای مجاور [۱۵]

پارامتر	مدرک تحصیلی
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

زمانی‌که یک بار الکتریکی با تکانه p از مارپیچ DNA عبور می‌کند، به‌دلیل میدان الکتریکی سیستم مارپیچ، یک میدان مغناطیسی در چارچوب بار الکتریکی ساکن ایجاد می‌شود که منجر به اندرکنش اسپین - مدار (SOC) می‌گردد. هامیلتونی SOC به‌صورت $H_{SO} = -\frac{\alpha}{\hbar}\hat{\sigma}.(\hat{r}\times\vec{\hat{p}})$ ارائه می‌شود [۱۴]. $\alpha = -(\frac{\hbar}{2m_e c})^2 E_r$ با جرم الکترون m_e، سرعت نور c و میدان الکتریکی شعاعی E_r معرفی می‌باشد. $\hat{r}$ مولفه شعاعی در مختصات استوانه‌ای، $\hat{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ ماتریس‌های پاولی، و $\vec{\hat{p}}$ عملگر تکانه خطی می‌باشد. اندرکنش اسپین - مدار بین دو رشته نیز به علت تقارن پتانسیل حذف می‌شود. در نمایش کوانتش دوم، H_{SO} به فرم زیر نوشته می‌شود:

$$H_{SO} = \sum_n [2it_{SO}\cos\theta(c_n^{\uparrow +}c_{n+1}^{\uparrow} - c_n^{\uparrow +}c_{n-1}^{\uparrow} - c_n^{\downarrow +}c_{n+1}^{\downarrow} + c_n^{\downarrow +}c_{n_1}^{\downarrow}) + D_{n,n+1}c_n^{\uparrow +}c_{n+1}^{\downarrow} - D_{n,n+1}^{*}c_n^{\downarrow +}c_{n+1}^{\uparrow} - D_{n-1}^{*}c_{\uparrow,}c_{n-1}^{\uparrow} - D_{n-1}c_n^{\uparrow +}c_{n-1}^{\downarrow}] \quad (4)$$

که :

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

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 $\Delta\varphi = \frac{\pi}{5}$ زاویه پیچش می‌باشد [۱۴].

جدول ۲: مقادیر پارامترهای DNA مورد استفاده در مدل PBH [۱٦و۱۳]

پارامتر	مدرک تحصیلی
m	۳۰۰ amu
a_{AT}	۶٫۹ $\overset{0}{A}^{-1}$
a_{GC}	۴٫۲ $\overset{0}{A}^{-1}$
D_{AT}	۰٫۰۵ eV
D_{GC}	۰٫۰۷۵ eV
k	۰٫۰۴ $eV/\overset{0}{A}^{2}$
b	۰٫۵
ρ	۰٫۳۵ $\overset{0}{A}^{-1}$
χ	[۰٫۶-۰٫۱] eV

اختلاف پتانسیل الکتریکی V_{sd} بین دو انتهای DNA ازطریق الکترودهای فلزی در دو انتهای سیستم توسط هامیلتونی زیر اعمال می‌شود:

$$H_{Lead} + H_{DNA-Lead} = \sum_k\sum_\sigma\{(\varepsilon_{L_k} + eV_{sd}/2)a_{L_k}^{\sigma +}a_{L_k}^{\sigma} + (\varepsilon_{R_k} - eV_{sd}/2)a_{R_k}^{\sigma +}a_{R_k}^{\sigma} + (t_L a_{L\ k}^{\sigma +}c_1^{\sigma} + t_R a_{R_k}^{\sigma +}c_N^{\sigma} + H.c.)\} \quad (5)$$

به‌طوری‌که $(a_{\beta_k}^{\sigma})a_{\beta_k}^{\sigma +}$ عملگر خلق (فنا) یک اسپینور در سایت k از الکترود $\beta = L,R$، $\varepsilon_{\beta_k} = 7.75\ eV$ انرژی در سایت الکترون در الکترودها، $t_\beta = 0.42\ eV$ انرژی پرش الکترون بین الکترودها و DNA می باشد. اثرات پراکندگی فونون روی سرعت، انرژی و چگالی الکترون‌ها منجر می‌شود که اندرکنش الکترون - فوتون را روی هامیلتونی سیستم در نظر بگیریم. درحضور اندرکنش‌های الکترون - فوتون و الکترون - فوتون، انرژی‌های در سایت الکترون و انرژی پرش الکترون بین سایت‌های مجاور به‌صورت زیر تغییر خواهد کرد [۱۸و۱۷]:

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

که M و g ، 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 $(\dot{c}_n = -\frac{i}{\hbar}[c_n, H_{tot}])$ به‌دست می‌آوریم. هدف از این مطالعه، بررسی اثر جفت‌شدگی

[Downloaded from icml.ir on 2025-11-04]

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 $I_n^\sigma - I_{n-1}^\sigma = e\frac{dn_n^\sigma}{dt}$ به‌دست می‌آید که I_n^σ جریان وابسته به اسپین موضعی و $n_n^\sigma = c_n^{\sigma+}c_n^\sigma$ می‌باشد. عملگرهای جریان‌های اسپینی $I^\sigma(t) = \sum_n I_n^\sigma$ به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$I^\uparrow(t) = \frac{ie}{\hbar}\sum_n [(t'_{n,n+1} + 2it_{SO}\cos\theta)c_{n+1}^{\uparrow+}c_n^\uparrow - (t'_{n-1,n} - 2it_{SO}\cos\theta)c_{n-1}^{\uparrow+}c_n^\uparrow + D_{n,n+1}c_{n+1}^{\uparrow+}c_n^\downarrow - D_{n-1,n}c_{n-1}^{\downarrow+}c_n^\uparrow] + t_L\sum_k(c_1^{\uparrow+}a_{L_k}^\uparrow - a_{L_k}^{\uparrow+}c_1^\uparrow) - t_R\sum_k(c_N^{\uparrow+}a_{R_k}^\uparrow - a_{R_k}^{\uparrow+}c_N^\uparrow) \quad (26)$$

$$I^\downarrow(t) = \frac{ie}{\hbar}\sum_n [(t'_{n,n+1} - 2it_{SO}\cos\theta)c_{n+1}^{\downarrow+}c_n^\downarrow - (t'_{n-1,n} + 2it_{SO}\cos\theta)c_{n-1}^{\downarrow+}c_n^\downarrow - D^*_{n,n+1}c_{n+1}^{\downarrow+}c_n^\uparrow + D^*_{n-1,n}c_{n-1}^{\uparrow+}c_n^\downarrow] + t_L\sum_k(c_1^{\downarrow+}a_{L_k}^\downarrow - a_{L_k}^{\downarrow+}c_1^\downarrow) - t_R\sum_k(c_N^{\downarrow+}a_{R_k}^\downarrow - a_{R_k}^{\downarrow+}c_N^\downarrow) \quad (27)$$

نتـــایج

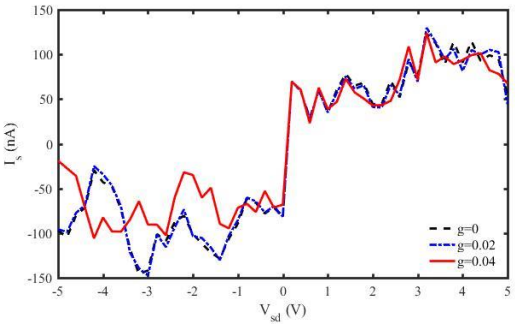
بررسی جریان‌های وابسته به اسپین در سیستم‌های زیستی از اهمیت بالایی برخوردار است. ما در این مطالعه، ایجاد و کنترل جریان‌های اسپینی در DNA را در حضور اندرکنش الکترون - فوتون و تابش نور بررسی می‌کنیم. برای این کار از بخشی از توالی کروموزوم ۲۲ انسان (CH22) با ۶۰ جفت باز استفاده می‌کنیم. CH22 از 33.4×10^6 نوکلئوتید تشکیل‌شده که ما فقط ۶۰ جفت باز از آن با توالی نوکلئوتید

AGGGCATCGCTAACGAGGTC GCCGTCCACAGCATCGCTAT

CGAGGACACCACACCGTCCA انتخاب 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 $I_s = I^\uparrow - I^\downarrow$ استخراج می‌شود و خواص گزینش اسپینی سیستم بررسی می‌شود.

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 V_{sd} به دو سر سیستم، نمودار مشخصه جریان - ولتاژ $(I_s - V_{sd})$ به‌دست می‌آید (شکل ۱).



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 زمانی‌که 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، به‌طوری‌که در مقادیر منفی ولتاژ بیشترین تفاوت در جریان اسپینی عبوری از سیستم نسبت به حالتی که جفت‌شدگی وجود ندارد مشاهده می‌شود.

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 می‌شود (شکل‌های ۲).

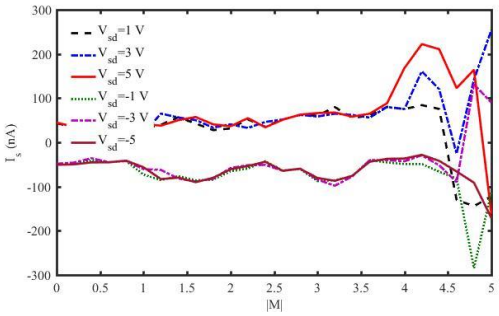
در شکل ۲-الف، تغییرات جریان اسپینی نسبت به تغییرات جفت‌شدگی الکترون - فوتون در ولتاژهای مختلف و در غیاب جفت‌شدگی الکترون - فوتون نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهد تا مقدار $|M| = 3.8\ eV$، جریان اسپینی به‌ازای ولتاژهای مثبت حول nA ۵۰+ نوسان می‌کند که نشان می‌دهد جریان اسپینی خالص مربوط به اسپین‌های بالاست و با معکوس کردن ولتاژ، جریان اسپینی حول nA ۵۰- نوسان می‌کند که نشان می‌دهد جریان اسپینی خالص مربوط به اسپین‌های پایین است.

[Downloaded from icml.ir on 2025-11-04]

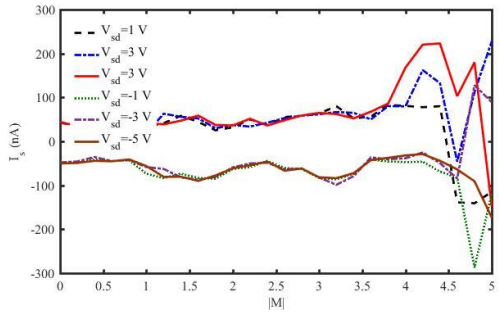
اما با افزایش مقدار جفت‌شدگی الکترون - فوتون جریان‌های اسپینی نامنظم شکل می‌گیرد و دامنه نوسان تا نزدیک ۳۰۰nA افزایش می‌یابد.

شکل ۲- ب، تغییرات جریان اسپینی نسبت به تغییرات جفت‌شدگی الکترون - فوتون به‌ازای مقدار جفت‌شدگی الکترون - فوتون g=0.02 را نشان می‌دهد. در این شرایط هم، تا مقدار $|M|=1\ eV$، جریان اسپینی حول ۵۰ nA نوسان می‌کند و بعد تا مقدار $|M|=3.8\ eV$، جریان اسپینی تا مقدار ۱۰۰ nA نوسان می‌کند. در این شرایط، همچنان به ازای ولتاژهای مثبت، جریان غالب مربوط به اسپین‌های بالا و با معکوس‌کردن ولتاژ، جریان غالب مربوط به اسپین‌های پایین می‌باشد. با افزایش مقدار جفت‌شدگی الکترون - فوتون از این مقدار، باز هم جریان‌های اسپینی با دامنه بالا شکل می‌گیرد.

الف)



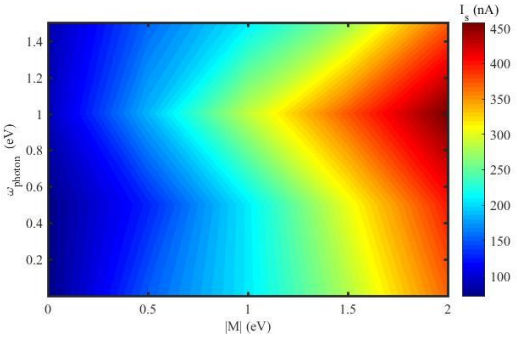
ب)



شکل ۲: تغییرات جریان خالص اسپینی نسبت به تغییرات جفت‌شدگی الکترون-فوتون برحسب eV به ازای مقادیر مختلف ولتاژ اعمالی برای توالی CH22 الف) g=0، ب- g=0.02 و $(\omega_{photon}=1.6\ eV)$.

همان‌طورکه در شکل‌های ۲ مشخص است، جفت‌شدگی الکترون - فوتون بیشینه $(M_{\max})$ که در آن بیشترین جریان اسپینی از سیستم عبور می‌کند، به‌ازای مقادیر مختلف g، مستقل از مقدار ولتاژ می‌باشد.

شکل ۳، تغییرات جریان اسپینی را نسبت به تغییر همزمان انرژی فوتون تابشی و مقدار جفت‌شدگی الکترون - فوتون نشان می‌دهد. در ولتاژ $V_{sd}=3\ V$ نشان می‌دهد. نتایج نشان می‌دهد که در مقدار جفت‌شدگی پایین، کمترین جریان اسپینی از سیستم عبور می‌کند حتی اگر انرژی فوتون‌های تابشی افزایش یابد. اما، زمانی که مقدار جفت‌شدگی الکترون - فوتون افزایش می‌یابد جریان اسپینی عبوری از سیستم نیز افزایش می‌یابد. زمانی‌که انرژی فوتون به $\omega=1\ eV$ می‌رسد، بیشترین مقدار جریان اسپینی از سیستم شارش پیدا می‌کند، به‌طوری‌که دامنه جریان به ۴۵۰ nA در مقدار جفت‌شدگی الکترون - فوتون $|M|\geq 1.7\ eV$ می‌رسد. با فزایش انرژی فوتون از این مقدار، مجدداً جریان اسپینی کاهش می‌یابد. می‌توان گفت حد آستانه انرژی فوتون برای عبور بیشترین جریان اسپینی مقدار $\omega=1\ eV$ می‌باشد.



شکل۳: تغییرات جریان خالص اسپینی نسبت به تغییر همزمان انرژی فوتون تابشی و مقدار جفت‌شدگی الکترون-فوتون $(V_{sd}=3\ V)$.

بحث

مطالعات نظری اخیر، تقویت جریان‌های اسپینی را به‌دلیل پولارون‌ها [۱۹]، همبستگی الکترونی [۲۰] و فونون‌ها [۲۱] گزارش کرده‌اند. با توجه به دینامیک سیستم، جریان‌های اسپینی و گزینش اسپینی ناشی از کایرال‌بودن 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. بااین‌حال، این‌که آیا یک قطبش اسپینی وجود دارد یا خیر، به توانایی چگالی الکترونی و تکانه زاویه‌ای برای حرکت بین

[Downloaded from icml.ir on 2025-11-04]

حالت‌های حالت پایه بستگی دارد. شایان ذکر است که تحریک نوری یک گروه‌دهنده در سیستم‌های انتقال الکترون می‌تواند باعث پلاریزاسیون بار شود، همان‌طورکه اعمال یک میدان الکتریکی به الکترودها می‌تواند قطبش بار ایجاد کند [۲۲]. در این حالت، دهنده و گیرنده الکترون، یک اختلاف پتانسیل الکتروشیمیایی تجربه می‌کنند 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 $g = 0\ eV$، 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 به‌علت پراکندگی الکترون‌ها توسط فونوهای شبکه بیان شود. اما زمانی‌که مقدار ولتاژ در جهت منفی از ۳٫۵ ولت افزایش می‌یابد، در برخی مقادیر ولتاژ، جریان عبوری از سیستم به ازای مقدار جفت‌شدگی الکترون - فوتون برابر $g = 0.04\ eV$ نسبت به حالت 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 $\varepsilon_n - \frac{g^2}{\omega_{phonon}} + \frac{|M|^2}{\omega_{photon}}$ 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 می‌شود که قبلاً هم در بررسی اندرکنش الکترون - فوتون برای نقاط کوانتومی گرافن مشاهده شده است [۲۳].

نتیجه‌گیری

اندرکنش با فوتون و تابش نور می‌تواند از عوامل تاثیرگذار بر ترابرد اسپین در سیستم‌های زیستی باشد. ما در این کار، تاثیر اندرکنش الکترون - فوتون و الکترون - فوتون را روی خواص انتقال اسپین DNA 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، جریان‌های مرتبط با اسپین‌های بالا و پایین به‌دست آمد. نتایج برمبنای مطالعه جریان‌های اسپینی نشان می‌دهند که با افزایش مقدار جفت‌شدگی الکترون - فوتون تغییرات فاحشی در جریان اسپینی عبوری از سیستم مشاهده می‌شود. با افزایش مقدار جفت‌شدگی الکترون - فوتون، جریان اسپینی عبوری از سیستم نسبت به حالت بالستیک کاهش می‌یابد، اما با افزایش ولتاژ در برخی مقادیر ولتاژ، با افزایش مقدار جفت‌شدگی الکترون - فوتون، جریان اسپینی نیز افزایش می‌یابد که بیانگر پدیده گذار بین باندهای الکترونی به کمک فونون‌ها می‌تواند بیان شود. ازطرفی، جفت‌شدگی الکترون - فوتون نیز تاثیر بسزایی روی جریان اسپینی عبوری از سیستم دارد، بطوریکه در مقدار جفت‌شدگی الکترون- فوتون پایین حتی با افزایش انرژی فوتون تغییر چندانی در جریان اسپینی مشاهده نمی شود اما زمانی‌که جفت‌شدگی الکترون - فوتون افزایش می‌یابد انرژی فوتون به‌عنوان یک فاکتور کلیدی عمل می‌کند که می‌تواند جریان اسپینی عبوری را کنترل کند. زمانی‌که 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 اپتوالکتریکی کاربرد دارد.

[Downloaded from icml.ir on 2025-11-04]

References

1- 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, Cold Spring Harbor symposia 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.

18- 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: The role of electron correlations. 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 phonon-mediated optical transitions. Physical Review B, 84(3), 035454

[Downloaded from icml.ir on 2025-11-04]