

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 (پیزوفوتوترونیک) 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 می‌شود 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 می‌تواند برای طراحی سوئیچ‌های قابل کنترل مورد استفاده قرار گیرد. مجدداً با افزایش ولتاژ شاهد تکرار متناوب این نواحی هستیم. بیشترین جریان از توالی 20 bp CG-20 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 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 پیزوفوتوترونیک کاربرد دارد. ابزارهای پیزوفوتوترونیک، 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: پیزوفوتوترونیک، مقاومت دیفرانسیلی منفی، دی ان ای، تنش مکانیکی، میدان الکتریکی نور

۰۴۴۳۱۹۸۰۲۲۹

شماره تماس:

مقدمه

مواد زیستی در سال‌های اخیر توجه دانشمندان زیادی را به خود جلب کرده است. محققان بسیاری ریزساختارها و عملکرد آنها را مورد مطالعه قرار داده‌اند. این مواد به دلیل سازگاری با طبیعت، تهیه آسان و غیرسمی بودن، دوست‌دار محیط زیست در نظر گرفته می‌شوند [۱]. در این میان، ساختارهای مارپیچ به دلیل انعطاف‌پذیری بالا در صنعت و پزشکی مورد استفاده بسیاری قرار می‌گیرند. مواد زیستی از جمله اسید نوکسی ریبونوکلیتیک (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 به دلیل ویژگی‌های منحصر به فرد آنها و سنتز آسانشان توجه زیادی را به خود جلب کرده است. به همین دلیل، 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 پیزوفوتوترونیک 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 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 به دلیل 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 بر اساس توالی DNA پیشنهاد شد [۷]. به همین ترتیب، 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 الکترونیک تحت تابش نور که خاصیت پیزوالکتریک هم داشته باشد، برای کاربردهای عملی الکترونیک در مقیاس نانو بسیار مهم است. در دستگاه‌های اپتوالکتریک 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 پیزوفوتوترونیک 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 می‌کنیم. سازوکارهای متفاوتی نظیر برهمکنش گرمایی به هنگام پرتودهی نور لیزر بر بافت بیولوژیکی، روی می‌دهد [۹]. برهمکنش گرمایی از جمله واکنش‌هایی است که هنگام تابش لیزر بر روی سیستم‌های زیستی ایجاد می‌شود و کاربرد بسزایی در لیزر پزشکی به ویژه در جراحی لیزری^۱ دارد. از طرفی نور لیزر دارای خواص منحصر به فردی مانند تک‌رنگ بودن، تکفام بودن و درخشندگی در واحد زاویه فضایی، با شدت‌های متفاوت است که به طور گسترده‌ای 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 در نظر گرفتن عوامل

^۱ Laser Surgery

محیطی دیگر همچون دما و تاثیر ولتاژ خارجی اعمال‌شده، پرداخت. مدل‌های مختلفی برای بررسی دینامیک DNA وجود دارد. ما در این کار از مدل PBH¹ که ترکیبی از مدل PBD و هولشتاین است، استفاده می‌کنیم. مدل PBD برای توصیف حرکات مکانیکی DNA بیان شده است که با ترکیب آن با مدل هولشتاین، می‌توان تاثیر بارالکتریکی را هم در آن در نظر گرفت. در نتیجه هامیلتونی کلی سیستم به صورت زیر نوشته می‌شود:

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

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 می‌شود [۱۳]:

$$H_{Light} = -t_{||} \sum [\exp(\frac{ier_0}{\hbar c} A(t)) C_{n,j}^+ C_{n+1,j} + H.C.] \quad (7)$$

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 به صورت زیر نوشته می‌شود [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 پهنای پالس است [۱۴]. H_{Lead_DNA} و H_{Lead} هامیلتونی‌های مربوط به الکترودها و برهمکنش آنها با زنجیره DNA هستند که به صورت زیر بیان می‌شوند [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 $(a_{\beta k})^+ a_{\beta k}$ با $\beta = L, R$ ، عملگر خلق (فنا) الکترون در الکتروده β ، $\mathcal{E}_{\beta j,k} = 0.075 \text{ eV}$ ، انرژی روی سایت الکترودها، V_b ولتاژ بایاس و $t_{\beta} = 4.2 \text{ eV}$ عناصر ماتریس تونل زنی از سایت k -ام الکتروده β به زنجیره DNA می‌باشند. 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 اعمال‌شده، پرداخت. مدل‌های مختلفی برای بررسی دینامیک DNA وجود دارد. ما در این کار از مدل PBH¹ که ترکیبی از مدل PBD و هولشتاین است، استفاده می‌کنیم. مدل PBD برای توصیف حرکات مکانیکی DNA بیان شده است که با ترکیب آن با مدل هولشتاین، می‌توان تاثیر بارالکتریکی را هم در آن در نظر گرفت. در نتیجه هامیلتونی کلی سیستم به صورت زیر نوشته می‌شود:

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

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 می‌کند [۱۱، ۱۲]:

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

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

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

که در آن C_n^+ و C_n عملگر خلق و نابودی الکترون در سایت n -ام است. \mathcal{E}_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:

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

ثابت اندرکنش الکترون - شبکه می‌باشد. χ

¹ Peyrard-Bishop-Holstein

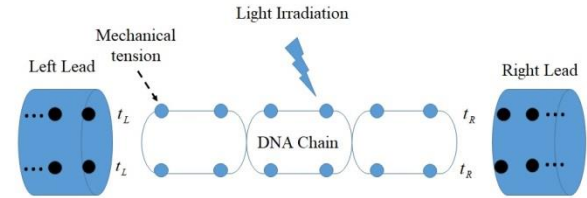
موضعی متناظر با $n_i = C_i^+ C_i^-$ است. بنابراین عملگر جریان الکتریکی کل ($I(t) = \sum_i I_i$) در حالت پایدار بدست می‌آید.

عوامل مختلفی از جمله تنش مکانیکی اعمال شده، بایاس الکتریکی اعمال شده، 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
\mathcal{E}_{A-T}	-4.9 eV
\mathcal{E}_{C-G}	-4.5 eV
t_{TT}, t_{AA}	-29 meV
t_{AT}	0.5 meV
t_{CT}, t_{AG}	3 meV
t_{TA}	2 meV
t_{CA}, t_{TG}	17 meV
t_{TC}, t_{GA}	-1 meV
t_{CC}, t_{GG}	20 meV
t_{GC}	-10 meV
t_{CG}	-8 meV

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



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 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 غیرخطی بوده 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 $\dot{\xi} = \frac{1}{M} \sum m \dot{y}_n^2 - NK_B T$ 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

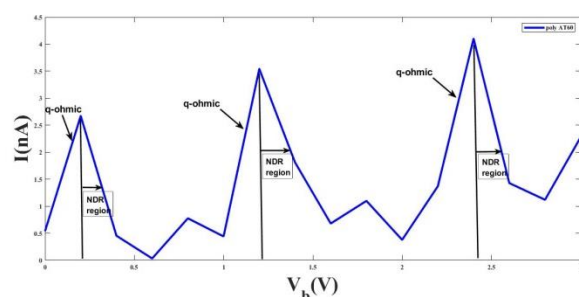
$$\text{از معادله هایزنبرگ } (\dot{a}_n = -\frac{i}{\hbar} [a_n, H]) \text{ بدست می‌آیند.}$$

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

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

و عملگر جریان I_i است.

تغییر می‌کند. این پدیده را می‌توان به عنوان پدیده دیفرانسیلی منفی (*NDR*) بیان کرد [۲۱ و ۲۲]. 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*

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

تأثیر دامنه و فرکانس نیروی اعمالی بر توالی‌ها

با ثابت گرفتن 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 ثابت گرفتن عوامل تأثیرگذار دیگر،

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

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

همان‌طور که 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 پیزوالکتریک در توالی *AT - 40 bp* است. در این شرایط بیشترین جریان عبوری در دامنه $F_0 = 1.6 \text{ pN}$ اتفاق افتاد، که مقدار آن 6.5 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 جفت پایه <i>AT</i>	\AA^{-1}	۴/۵
a_{CG}	عرض پتانسیل مورس برای جفت پایه <i>CG</i>	\AA^{-1}	۶/۹
D_{AT}	عمق پتانسیل مورس برای جفت پایه <i>AT</i>	eV	۰/۰۵
D_{CG}	عمق پتانسیل مورس برای جفت پایه <i>CG</i>	eV	۰/۰۷۵
κ	ثابت اتصال	$eV / \text{\AA}^2$	0.025
ρ	پارامتر پتانسیل توده ای		۰/۵
b	ثابت میرایی	\AA^{-1}	۰/۳۵

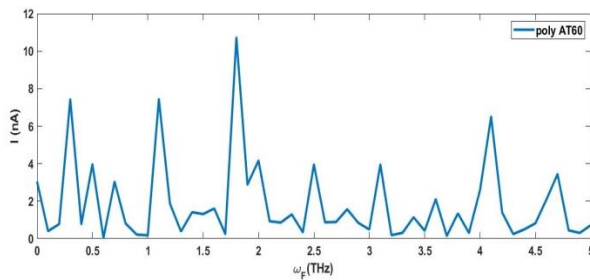
یافته‌ها

تأثیر میدان الکتریکی بر توالی‌ها

با ثابت گرفتن دامنه و فرکانس نیروی مکانیکی اعمالی و نور تابشی، تأثیر ولتاژ اعمالی را بر روی توالی‌ها را در دمای $T = 300 \text{ K}$ بررسی می‌کنیم. انتقال جریان در یک سیستم بیومولکولی از طریق تغییر ولتاژ می‌تواند کنترل شود. در مطالعه اخیر تأثیر ولتاژ بر رسانایی الکتریکی ناشی از خاصیت پیزوالکتریک و تابش نور در قالب منحنی مشخصه جریان - ولتاژ بررسی می‌کنیم. به همین خاطر توالی‌های مورد نظر را به الکترودهایی با ولتاژ قابل تنظیم متصل می‌کنیم.

مولکول *DNA* رفتارهای متفاوتی در برابر تغییر ولتاژ اعمال شده، از خود نشان می‌دهد. همان‌طور که 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

جریان عبوری را بررسی می‌کنیم. همان‌طور که 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 می‌افتد که مقدار آن $10.73 nA$ است (شکل ۵).

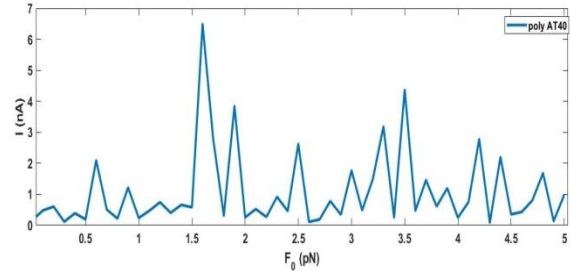


شکل ۵- نمودار جریان برحسب فرکانس نیروی اعمالی

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

تأثیر دامنه نور تابشی بر توالی‌ها

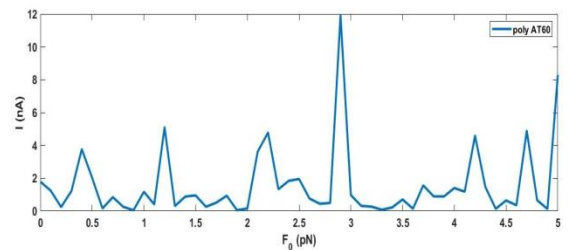
در این قسمت تأثیر دامنه نور تابشی را برای توالی‌ها مورد بررسی قرار می‌دهیم. با ثابت گرفتن دیگر عوامل تأثیرگذار، دامنه نور تابشی را از صفر تا ۱ در واحد $\frac{\hbar c}{ie r_0}$ تغییر داده و تأثیر آن را بر جریان عبوری از توالی بررسی می‌کنیم. با توجه به شکل ۶ در توالی AT با طول ۲۰ جفت باز مشاهده می‌کنیم که تا $A_0 = 0.2 \frac{\hbar c}{ie r_0}$ جریان عبوری تقریباً صفر است. در دو ناحیه یعنی از $A_0 = 0.4 \frac{\hbar c}{ie r_0}$ تا $A_0 = 0.5 \frac{\hbar c}{ie r_0}$ و $A_0 = 0.9 \frac{\hbar c}{ie r_0}$ جریان قابل توجهی عبور می‌کند که می‌توان از این شرایط به عنوان آشکارساز استفاده کرد و بیشترین مقدار جریان نیز در $A_0 = 0.9 \frac{\hbar c}{ie r_0}$ و مقدار آن $3.26 nA$ است.



شکل ۳- نمودار جریان برحسب دامنه نیروی اعمالی

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

در توالی AT با طول ۶۰ جفت باز نیز با ثابت گرفتن عوامل تأثیرگذار دیگر، دامنه نیرو را برای توالی از صفر تا ۵ پیکونیوتون (pN) تغییر داده و تأثیر 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 $AT - 60 bp$ است. در این شرایط بیشترین جریان عبوری در دامنه $F_0 = 2.9 pN$ اتفاق افتاد که مقدار آن $11.92 nA$ است.



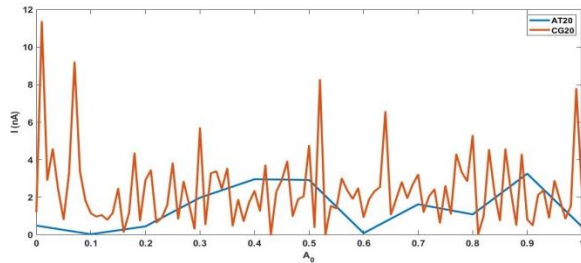
شکل ۴- نمودار جریان برحسب دامنه نیروی اعمالی

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

تأثیر فرکانس نیروی اعمالی بر توالی‌ها

فرکانس نیروی اعمالی را برای توالی‌ها از صفر تا ۵ تراهرتز (THz) تغییر داده و تأثیر آن را بر میزان و نحوه عبور جریان الکتریکی از طول توالی را بررسی کردیم. برای توالی AT با طول‌های ۶۰ جفت باز

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

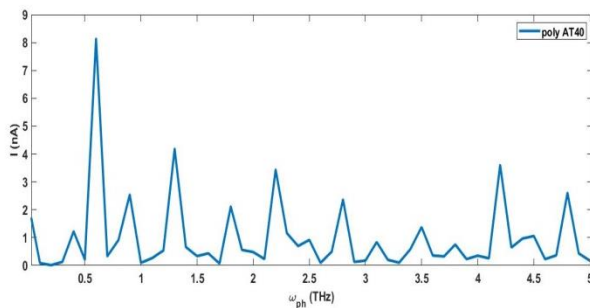


شکل ۸- نمودار مشخصه جریان-ولتاژ برای دو توالی $AT-20 bp$ و $CG-20 bp$

تأثیر فرکانس نور تابشی بر توالی‌ها

در این قسمت تأثیر فرکانس نور تابشی را برای توالی‌ها مورد بررسی قرار می‌دهیم. با ثابت گرفتن دیگر عوامل تأثیرگذار، فرکانس نور تابشی را از صفر تا ۵ تراهرتز (THz) تغییر داده و تأثیر آن را بر جریان عبوری از توالی بررسی می‌کنیم.

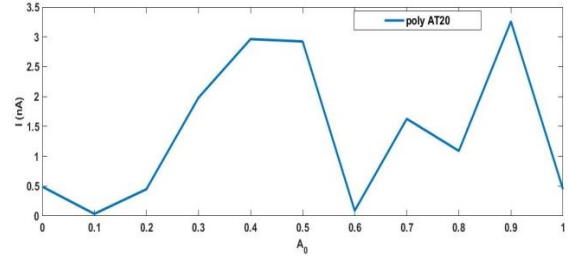
با توجه به شکل ۹ در توالی AT با طول ۴۰ جفت باز مشاهده می‌کنیم که $\omega_{photon} = 0.6 THz$ جریان قابل توجهی از توالی $AT-40 bp$ عبور می‌کند که مقدار آن $8.13 nA$ است.



شکل ۹- نمودار جریان برحسب فرکانس نور تابشی

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

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



شکل ۶- نمودار جریان برحسب دامنه نور تابشی

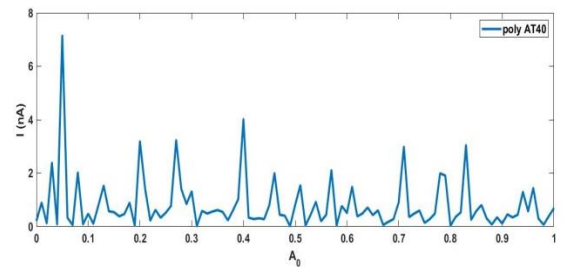
$$V_b = 10V, F_0 = 2.2pN, \omega_{Force} = 0.8 \frac{\hbar c}{ie r_0}, \omega_{ph} = 0.1THz, T = 300K$$

حال با ثابت گرفتن دیگر عوامل تأثیرگذار، دامنه نور تابشی را از

صفر تا ۱ در واحد $\frac{\hbar c}{ie r_0}$ تغییر داده و تأثیر آن را بر جریان عبوری از

توالی AT با طول ۴۰ جفت 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 $A_0 = 0.05 \frac{\hbar c}{ie r_0}$

مقدار آن $8.13 nA$ است.



شکل ۷- نمودار جریان برحسب دامنه نور تابشی

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

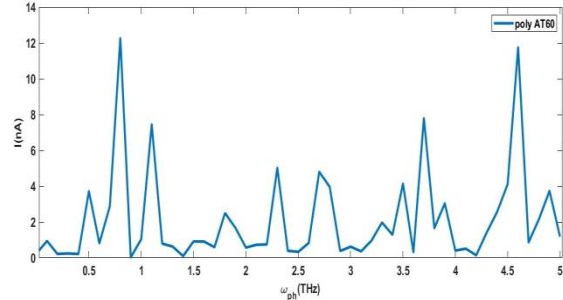
حال تأثیر دامنه نور تابشی را برای دو توالی $AT-20 bp$ و

$CG-20 bp$ مقایسه می‌کنیم. با توجه به شکل ۸ مشاهده

می‌کنیم که جریان عبوری از توالی $CG-20 bp$ دارای نوسانات

نتیجه گیری

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 در نظر 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 در نهایت، 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 فرودی را نشان می‌دهد. نوسان ناشی از نور می‌تواند به دلیل 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 شناسایی شده 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 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 منطقی، و حافظه، و همچنین سوئیچینگ سریع را پوشش می‌دهد. مکانیسم بروز NDR را می‌توان به صورت زیر توضیح داد: هنگامی که

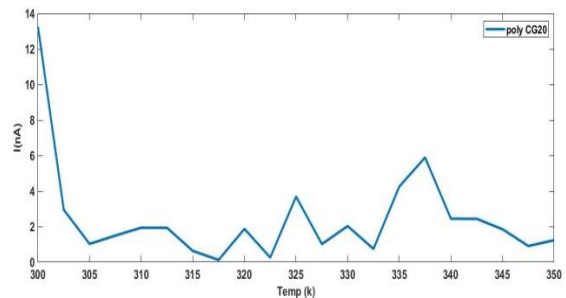


شکل ۱۰- نمودار جریان برحسب فرکانس نور تابشی

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

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 می‌کند [۲۲]. رفتار جریان الکتریکی عبوری از توالی $CG - 20 bp$ در شکل ۱۱ بررسی شده است. دما را از دمای اتاق ($300 K$) تا دمای $350 K$ تغییر دادیم. مشخص است با افزایش دما جریان عبوری از توالی کاهش می‌یابد به طوری که بیشترین جریان در دمای اتاق یعنی $300 K$ عبور می‌کند که مقدار آن $13.27 nA$ است.



شکل ۱۱- نمودار جریان برحسب دمای محیط

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

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 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.

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 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 الکتروود منبع افزایش می‌یابد. اگر انرژی این اوربیتال مولکولی بسیار بالاتر از پتانسیل الکتروشیمیایی الکتروود 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 توجهی ندارد. بنابراین، جریان خالص از طریق مولکول DNA اشباع می‌شود. علاوه بر این، یک اغتشاش کوچک در مولکول DNA از طریق تابش می‌تواند جابجایی های اتمی در مولکول DNA ایجاد کند، مانند طولانی شدن و تضعیف پیوندهای مولکولی خاص. از این رو، 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 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., & 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.