

## مشاهده پدیده پیزوالکتریک در زنجیره های DNA: طراحی یک حسگر زیستی

سمیرا فتحی زاده

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه

### چکیده

توسعه حسگرهای زیستی که می تواند برای آشکارسازی مواد و بیماری ها مورد استفاده قرار گیرد دارای اهمیت بالایی است. در این کار سعی شده است که بروز پدیده پیزوالکتریک در زنجیره DNA مورد بررسی قرار گیرد تا بر مبنای آن بتوان یک ابزار حسگر زیستی را طراحی نمود. بروز پدیده پیزوالکتریک با مشاهده تغییرات جریان عبوری از زنجیره در اثر تغییرات نیروی مکانیکی اعمالی محقق می شود. از طرفی محدوده ای از دامنه و فرکانس تنش اعمالی مشخص می شود که در آن یک سیگنال مشخصه بعنوان علامتی برای نشان دادن تغییرات در تراپرد الکتریکی DNA آشکار می شود که می تواند در کاربردهای حسگری مورد استفاده قرار گیرد. نوع توالی زنجیره پلی مری نیز بعنوان یکی از فاکتورهای موثر در آشکارسازی مورد مطالعه قرار می گیرد.

یکی از کاربردهای مهم علم نانو در استفاده از مواد در مقیاس نانو، ساخت حسگرها می باشد. در این میان، حسگرهای زیستی توجه بسیاری را به خود جلب کرده اند. یک حسگر زیستی وسیله ای است که می تواند مجموعه ای از داده های کمی را با استفاده از عنصر شناساگر زیستی فراهم نماید. این داده ها می توانند ناشی از تغییرات در میزان بار الکتریکی یا جرم مولفه انتقال و یا تغییرات جذب یا گسیل نوری باشند که منجر به تولید سیگنال می شوند [1]. این سیگنال می تواند در غالب نور، جریان یا پتانسیل الکتریکی آشکارسازی شود. حسگرهای زیستی در قیمت های پایین، با حساسیت بالا و واکنش سریع ساخته می شوند و می توانند در آرایه هایی بعنوان مثال برای شناسایی عوامل بیماری زا مورد استفاده قرار گیرند [2]. برخی از این حسگرها، سیستم هایی با ابعاد کم هستند که با واکنش الکتریکی به تنش های مکانیکی کار می کنند. این حسگرها که به حسگرهای پیزوالکتریک شهرت دارند از موادی ساخته شده اند که درجات آزادی مکانیکی و الکتریکی در آنها جفت شده اند. نیروی مکانیکی با تغییر در فضای بین اتمی مواد پیزوالکتریک موجب تغییر گاف انرژی ماده و در نتیجه تغییر مقاومت الکتریکی ماده می شود. تاکنون، خاصیت پیزوالکتریک در ابزارهای مولکولی ساده و مولکول های منفرد که بین دو الکتروود قرار دارند مشاهده شده است و گزارش های بسیار محدودی از خواص پیزوالکتریک مولکول های پیچیده مثل زنجیره DNA وجود دارد. مطالعه خواص پیزوالکتریک در زنجیره های DNA می تواند به درک خواص تراپرد الکتریکی DNA کمک کرده و در صورت بروز این پدیده، آن را بصورت کاندیدایی برای استفاده در حسگرها تبدیل نماید. در این کار، ما سعی خواهیم کرد که بصورت تئوری به بررسی بروز پدیده پیزوالکتریک در زنجیره های DNA و مطالعه عوامل موثر در آن پردازیم.

ابتدا به معرفی معادله هامیلتونی متناظر با سیستم DNA می پردازیم که باید شامل جملات انتقال بار الکتریکی و همچنین اعمال نیروی مکانیکی باشد. چنین سیستمی می تواند با عباراتی بصورت  $H = H_{electrical} + H_{mechanical}$  بیان شود.  $H_{electrical}$  هامیلتونی قسمت الکتریکی مدل را توصیف می کند که مطابق با مدل پیرارد-بیشاپ-هولشتاین (PBH) بصورت زیر بیان می شود [3]:

$$H_{electrical} = H_{lat} + H_{car} + H_{int} \quad (1)$$

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

$$H_{car} = \sum_n \varepsilon_n c_n^+ c_n - t_{n,n+1} c_n^+ c_{n+1} + H.c. \quad (3)$$

$$H_{int} = \sum_n \chi y_n c_n^+ c_n \quad (4)$$

بطوریکه  $y_n$  جابجایی بازها در راستای پیوند هیدروژنی است،  $V(y_n) = D_n (e^{-\alpha_n y_n} - 1)^2$  پتانسیل مورس و  $W(y_n, y_{n+1}) = \frac{k}{2} (1 + \rho e^{-b(y_{n+1} + y_n)}) (y_{n+1} - y_n)^2$  پتانسیل زنجیره می باشد که به ترتیب برای توصیف اندرکنش عرضی و طولی بازها استفاده می شوند.  $\varepsilon_n$  و  $t_{n,n+1}$  نیز به ترتیب انرژی در جایگاه الکترون و انرژی پرش الکترون بین جایگاه های جفت بازها را بیان می کند و  $(c_n^+ c_n)$  نیز عملگر خلق (فنا) الکترون در سایت  $n$ -ام و  $\chi$  ثابت جفت شدگی الکترون با شبکه می باشد.  $H_{mechanical}$  نیز نیروی مکانیکی وارد بر جفت باز اول در شبکه را بیان می کند [4]:

$$H_{mechanical} = -\delta_{1,n} (y_{n+1} - y_n) F \sin(\omega t) \quad (5)$$

که  $F$  و  $\omega$  به ترتیب دامنه و فرکانس نیروی اعمالی را مشخص می کنند. در این کار، زنجیره DNA بین دو الکترون فلزی قرار گرفته که اختلاف پتانسیل الکتریکی از طریق آنها به زنجیره اعمال می شود. هامیلتونی معرف الکترودهای فلزی می تواند بصورت زیر بیان شود [5]:

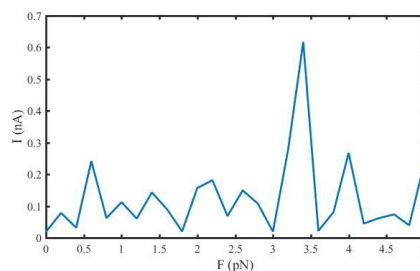
$$H_{leads} = \sum_k (\varepsilon_{L,k} + eV_b/2) a_{L,k}^+ a_{L,k} + (\varepsilon_{R,k} - eV_b/2) a_{R,k}^+ a_{R,k} + t_L a_{L,k}^+ c_1 + t_R a_{R,k}^+ c_N + H.c. \quad (6)$$

که در آن  $\varepsilon_{\beta,k}$  ( $\beta = L, R$ )، انرژی سایت های الکترودها،  $t_\beta$  انرژی پرش الکترون بین الکترودها و DNA و  $V_b$  و  $e$  به ترتیب ولتاژ اعمالی و بار الکترون می باشد.

در این کار معادلات تحول مربوط به قسمت های مکانیکی و الکتریکی به ترتیب براساس معادلات هامیلتون و معادلات هایزنبرگ استخراج شده است (تمامی پارامترها مطابق با مراجع [6-8] در نظر گرفته شده اند). همچنین، عملگر جریان الکتریکی کل سیستم مطابق معادله پیوستگی می تواند بصورت زیر نوشته شود:

$$I(t) = \frac{ie}{\hbar} \left( \sum_n (t_{n,n+1} c_{n+1}^+ c_n - t_{n,n-1} c_{n-1}^+ c_n) + \sum_k t_L (c_1^+ a_{L,k} - a_{L,k}^+ t_1) + t_R (c_N^+ a_{R,k} - a_{R,k}^+ c_N) \right) \quad (7)$$

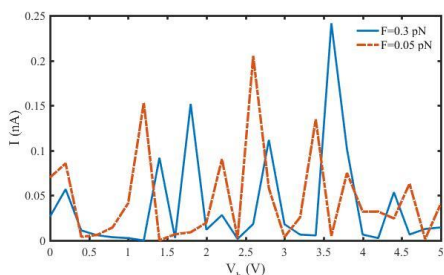
پاسخ الکتریکی توالی poly(AT) به تنش مکانیکی اعمالی شده در غالب تغییرات جریان الکتریکی در شکل 1 نشان داده شده است. بنابراین می توان بروز پدیده پیزوالکتریک در توالی های DNA را بطور واضح ملاحظه کرد. تغییرات جریان الکتریکی نشان می دهد که توالی DNA به تغییرات نیرو بسیار حساس بوده و در ناحیه اعمال نیرو بین 3-5 pN پیک مشخصه ای ظاهر می شود که می تواند در کاربردهای حسگری مورد استفاده قرار گیرد.



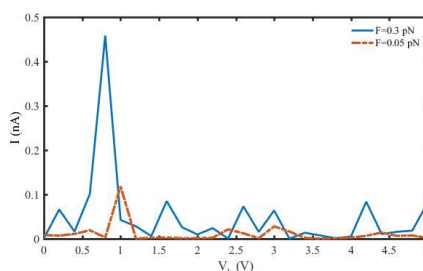
شکل 1: تغییرات جریان الکتریکی عبوری از توالی poly(AT) نسبت به تنش مکانیکی اعمالی با فرکانس  $\omega = 0.57 \text{ Hz}$ .

تأثیر نیروی اعمالی نسبت به نوع توالی بکار رفته می تواند در نمودار مشخصه جریان-ولتاژ نیز مطالعه شود (شکل 2 و 3). در توالی poly(CG)، مشخصه I-V در نیروی بسیار ضعیف، سیگنال خیلی موثری نشان نمی دهد و دارای تغییرات جریان در محدوده بسیار کم می باشد، در حالیکه در نیروی نسبتاً قوی دارای پیک مشخصه ای در محدوده

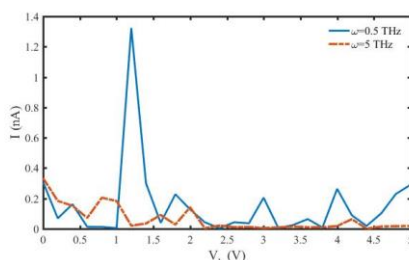
ولتاژ پایین است (شکل ۲). توالی poly(AT) در هر دو مقدار نیرو بسیار حساس عمل می کند و بصورت متوالی پیک هایی را نشان می دهد که برای آشکارسازی سیگنال های کوچک هم می تواند مورد استفاده قرار گیرد.



شکل ۳: مشخصه I-V برای توالی poly(AT).



شکل ۲: مشخصه I-V برای توالی poly(CG).



شکل ۳: مشخصه I-V برای توالی poly(CG) در فرکانس های متفاوت.

در این کار، مشخصه I-V برای توالی poly(CG) در فرکانس های متفاوت تنش اعمالی نیز مطالعه می شود (شکل ۳). نشان داده شده که در فرکانس بالا، جریان عبوری دارای نوسانات شدید در محدوده پایین است ولی زمانیکه فرکانس کاهش پیدا می کند، جریان همچنان دارای نوساناتی در محدوده پایین است ولی دارای پیک مشخصه ای در محدوده 1-15 ولت می باشد. بنابراین می توان گفت در محدوده فرکانس پایین، این محدوده ولتاژ می تواند بعنوان یک سیگنال برای حس گر مورد استفاده قرار گیرد.

## نتیجه گیری

در این کار سعی شده است که بروز پدیده پیزوالکتریک در زنجیره های DNA برای استفاده در حسگرها مطالعه شود. با اعمال مقادیر متفاوت نیروی مکانیکی و مشاهده تغییرات جریان عبوری از زنجیره بروز این پدیده اثبات می شود. از طرفی با تغییر دامنه و فرکانس تنش اعمالی به دو توالی مختلف، محدوده هایی که سیگنال های مشخصه برای کاربرد در حسگرها بروز می کنند مشخص می شود.

## مرجع ها

1. A. Sassolas, B. D. Leca-Bouvier, L. J. Blum, L. J. *Chem. Rev.* **108** (2008) 109.
2. A. Rode, S. Sharma, D. K. Mishra, *Curr. Drug. Deliv.* **15** (2018) 620.
3. S. Behnia, S. Fathizadeh, *Phys. Rev. E* **91** (2015) 022719.
4. B. Q. Ai, D. He, B. Hu, *Phys. Rev. E* **81** (2010) 031124.
5. S. Fathizadeh, S. Behnia, J. Ziaei, *J. Phys. Chem. B* **122** (2018) 2487.
6. S. Komineas, G. Kalosakas, A. R. Bishop, *Phys. Rev. E* **65** (2002) 061905.
7. A. M. Guo, Q. F. Sun, *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 218102.
8. C. Simserides, *Chem. Phys.* **440** (2014) 31.