

طراحی یک سیستم زیستی اپتوالکتریکی بر مبنای زنجیره DNA

الهه جوانشور، سمیرا فتحی زاده، سهراب بهنیا، فاطمه نعمتی

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی ارومیه

چکیده

در سال‌های اخیر مولکول دی ان ای به دلیل خاصیت خودآرانی و مکانیکی در دستگاه اپتوالکترونیک در ابعاد نانو، توجه ویژه‌ای را به خود معطوف کرده است. مواد مبتنی بر دی ان ای خواص نوری منحصر به فردی از جمله اپتیک غیرخطی، افزایش نوری و قطبی شدن را نشان می‌دهند. در این مطالعه سعی شده است با در نظر گرفتن ترکیب مدل پیارد-بیشاپ-هولشتاین با مدل نردبانی (CL) برای بررسی تاثیر نور و همچنین تاثیر عوامل مختلف مانند تغییر فرکانس و دامنه میدان الکتریکی به بررسی تعامل نور با دی ان ای پرداخته شود. تغییرات جریان بر حسب فرکانس نور فرودی می‌تواند محدوده‌هایی که جریان بیشتری از سیستم عبور می‌کند را نشان دهد.

امروزه، مطالعه تاثیر نور بر روی سیستم‌های بیولوژیک توجه زیادی را به خود معطوف کرده است. استفاده از مواد غیرآلی متحمل هزینه بالایی برای صنعت می‌باشد لذا مواد آلی به دلیل سهولت و سازگاری بالا در سیستم‌های بیولوژیک، ارزان بودن و انعطاف پذیری مورد توجه قرار گرفته است [۱]. مولکول‌های زیستی اغلب خواص الکتریکی و نوری طبیعی دارند که برای بهبود عملکرد دستگاه‌ها تنظیم می‌شوند [۲]. مواد آلی در برنامه‌های کاربردی مانند صفحه نمایش نور و ترانزیستورهای آلی استفاده می‌شود [۳]. در این مقاله از مولکول دی اکسی ریونوکلیک اسید (DNA) به عنوان یک بیومولکول با قابلیت سازگاری با سیستم‌های بیولوژیک استفاده شده است [۴]. قابلیت برنامه-ریزی، انعطاف‌پذیری و همچنین هزینه پایین سنتز باعث استفاده گسترده DNA برای ساخت ساختارهای مولکولی و ساختارهای الکترونی مولکولی [۶و۵] مانند نانو سیم‌های DNA [۷]، دیودها [۸] و ترانزیستورها شده است. در این مقاله از ترکیب مدل پیارد-بیشاپ-هولشتاین^۱ (PBH) با مدل نردبانی (CL) برای بررسی تاثیر نور استفاده شده است و همچنین تاثیر عوامل مختلف مانند تغییر فرکانس و دامنه میدان الکتریکی مورد بررسی قرار گرفته است. مدل PBH به دلیل در نظر گرفتن اندرکنش متقابل بار الکتریکی و نوسانات شبکه، می‌تواند برای توصیف مکانیسم انتقال بار در شبکه مورد استفاده قرار بگیرد [۹]. در این راستا مدل CL که از مدل‌های رایج در مطالعه انتقال بار در DNA می‌باشد به سیستم مورد نظر اضافه شد [۱۰]. هامیلتونی کلی سیستم به صورت زیر است:

$$H = H_{PBH} + H_{CL} + H_E \quad (1)$$

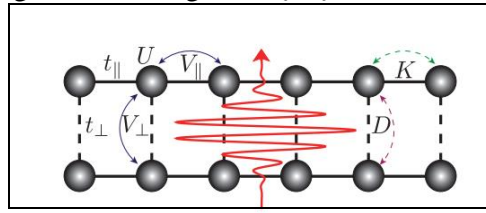
هامیلتونی PBH به صورت $H_{PBH} = H_{lat} + H_{car} + H_{int}$ می‌باشد که H_{lat} ، H_{car} ، H_{int} به ترتیب هامیلتونی شبکه، حامل‌های بار و برهمکنش الکترون-شبکه می‌باشند.

هامیلتونی H_{CL} (مدل نردبانی) به صورت زیر بیان می‌شود:

$$H_{CL} = \sum_{j=1,2} \sum_i \varepsilon_{j,i} (c_{j,i}^\dagger c_{j,i} + H.C.) - t_{//} \sum_{j=1,2} \sum_i (c_{j,i}^\dagger c_{j,i+1} + H.C.) - t_{\perp} \sum_i \exp(-py_i) (c_{1,i}^\dagger c_{2,i} + H.C.) + \frac{U}{4} \sum_{j=1,2} \sum_i n_{j,i}^2 + V_{//} \sum_{j=1,2} \sum_i n_{j,i} n_{j,i+1} + V_{\perp} \sum_i \exp(-\chi y_i) n_{1,i} n_{2,i} \quad (2)$$

بطوریکه j تعداد رشته‌ها و i ، تعداد سایت‌ها در هر رشته می‌باشند. $(c_{j,i}^\dagger c_{j,i})$ عملگر خلق (فنا) یک الکترون در سایت (j,i) ، $\varepsilon_{j,i}$ انرژی روی سایت الکترون، $t_{//}$ انتگرال پرش بین جفت بازهای مجاور، t_{\perp} انتگرال پرش بین جفت بازهای داخلی، p ، ثابت جفت شدگی، y_i کشش باند \dot{I} ام، $n_{j,i} = c_{j,i}^\dagger c_{j,i}$ (حاصل ضرب عملگر فنا و خلق)، $V_{//}$ برهمکنش کلمبی

بین بازهای مجاور، V_{\perp} برهمکنش کلمبی بین بازهای مکمل، λ معکوس طول دبی، D پتانسیل مورس بین بازها و K برهمکنش غیر خطی استکینگ بین بازهای مجاور (اثر حرکت طولی نوکلئوتیدها) می باشد (شکل ۱).



شکل ۱: مدل شماتیکی از DNA در مدل PBH ترکیب شده با CL

هامیلتونی H_E بصورت زیر می باشد [۱۰]:

$$H_E = -t_{\parallel} \sum_{j=1,2} \sum_i \left[\exp\left(\frac{ier_0}{\hbar c} A(t)\right) c_{j,i}^{\dagger} c_{j,i+1} + H.C. \right] \quad (3)$$

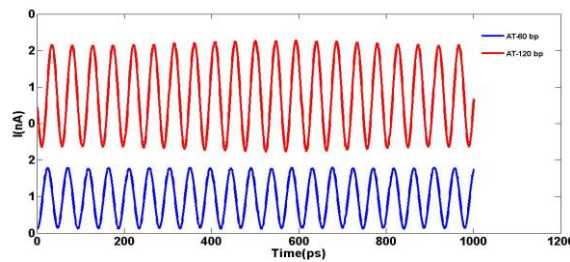
که در معادله فوق، r_0 فاصله بین بازهای مجاور در یک رشته، e و c به ترتیب بارالکتریکی و سرعت نور و $A(t)$ بردار

$$\text{پتانسیل به صورت } A(t) = A_0 \cos(\omega t) \exp\left[-\frac{(t-t_c)^2}{2\tau^2}\right] \text{ می باشند.}$$

در مدل انتخابی حاضر بیشتر جملات غیرخطی هستند و حساسیت بالایی به شرایط اولیه دارند. تحلیل سری زمانی حاصل از معادلات تحول DNA نشان می دهد که تحول فضایی ای سیستم همانند سیستم های آشوبناک است. معادلات تحول حاکم بر قسمت مکانیکی و الکتریکی به ترتیب از معادلات هامیلتون و هایزنبرگ استخراج می شود جریان از روی معادلات به صورت زیر بدست می آید:

$$I = \frac{-ie}{\hbar} \left\{ \sum_n V_{n,n+1} (c_n^{\dagger} c_{n-1}^{\dagger} - c_{n-1}^{\dagger} c_n) + V_{n,n+1} (c_n^{\dagger} c_{n+1}^{\dagger} - c_{n+1}^{\dagger} c_n) + \sum_{j,k} t_L [a_{j,k,L}^{\dagger} c_{j,1} - c_{j,1}^{\dagger} a_{j,k,L}] + \sum_{j,k} t_R [a_{j,k,R}^{\dagger} c_{j,N} - c_{j,N}^{\dagger} a_{j,k,R}] - t_{\parallel} \sum_{j,n} (c_{j,n+1}^{\dagger} c_{j,n} - c_{j,n}^{\dagger} c_{j,n+1}) + c_{j,n-1}^{\dagger} c_{j,n} - c_{j,n}^{\dagger} c_{j,n-1} \right\} \quad (4)$$

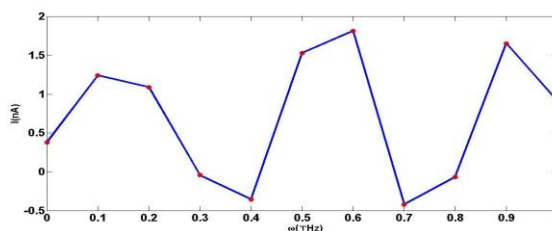
اطلاعات در مورد پاسخ الکتریکی یک سیستم می تواند در قالب تغییرات جریان، نسبت به عوامل موثر بررسی شود. در این کار، ابتدا سری زمانی جریان عبوری از سیستم را برای توالی poly(A-T) با طول های متفاوت بررسی می کنیم (شکل ۲).



شکل ۲: سری زمانی جریان عبوری برای دو توالی DNA با طول های متفاوت

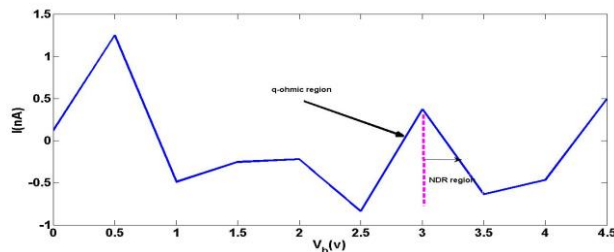
همان طور که از شکل ۲ مشاهده می شود جریان نسبت به زمان به صورت تناوبی تقریباً منظم تغییر می کند. اگر به ازای دو طول متفاوت این نمودار رسم شود می توان نتیجه گرفت که در طول های بالاتر، دامنه جریان عبوری بیشتر می شود ولی شکل کلی جریان ثابت می ماند.

مطابق شکل ۳ تغییرات جریان عبوری نسبت به فرکانس نور تابشی بررسی شده است.



شکل ۳: تغییرات جریان عبوری نسبت به فرکانس نور تابشی

شکل ۳ که تغییرات جریان عبوری از سیستم نسبت به فرکانس نور فرودی را نشان می‌دهد بیان می‌کند که به ازای فرکانس‌های مشخص، جریان به بیشترین مقدار خود می‌رسد. تا جایی که در حدود $\omega = 0.6 \text{ THz}$ جریانی نزدیک به $I = 2 \text{ nA}$ از زنجیره DNA عبور می‌کند. همچنین در فرکانس‌های $\omega = 0.4 \text{ THz}$ و $\omega = 0.7 \text{ THz}$ تقریباً می‌توان گفت هیچ جریانی از سیستم عبور نمی‌کند، پس می‌توان محدوده‌ای از فرکانس نور تابشی که جریان بیشینه از سیستم عبور می‌کند را بدست آورد. در این کار، به ازای فرکانسی که در شکل ۳ به عنوان فرکانس نور برای جریان ماکزیمم ($\omega = 0.6 \text{ THz}$) مشخص شده، مشخصه جریان-ولتاژ (I-V) را مطالعه نموده‌ایم.



شکل ۴: نمودار مشخصه جریان ولتاژ

همان طور که از شکل ۴ مشاهده می‌شود، تغییرات جریان نسبت به اختلاف پتانسیل اعمال شده به دو سر DNA بسیار شدید می‌باشد، به طوری که ابتدا شاهد افزایش جریان نسبت به ولتاژ تا محدوده مشخص هستیم و سپس جریان نسبت به ولتاژ کاهش می‌یابد، یعنی می‌توان گفت پدیده مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR) ظاهر شده است. سپس با افزایش ولتاژ، مجدداً شاهد افزایش جریان و به دنبال آن کاهش جریان هستیم، یعنی به صورت متناوب، جریان شبه اهمی و سپس مقاومت دیفرانسیلی منفی ظاهر می‌شود.

نتیجه گیری

مطالعه واکنش الکتریکی سیستم‌های زیستی نسبت به تابش نور دارای اهمیت زیادی در نانوالکترونیک و اپتوالکترونیک می‌باشد. در این کار، اندرکنش DNA با نور فرودی و پاسخ الکتریکی آن مورد بررسی قرار گرفته است. در این مطالعه سعی شده است که محدوده مناسبی برای فرکانس نور تابشی مشخص شود که منجر به عبور جریان الکتریکی بیشینه از سیستم می‌شود و با انتخاب فرکانس مورد نظر، مشخصه I-V سیستم مطالعه شود. نتایج حاکی از بروز نواحی شبه اهمی و مقاومت دیفرانسیلی منفی در نمودار مشخصه I-V می‌باشد.

مرجع ها

- [۱] Szulczewski, G., Sanvito, S., & Coey, M. (2009). *A spin of their own*. **8(9)**, 693.
- [۲] Gomez, E. F., Venkatraman, V., Grote, J. G., & Steckl, A. J. (2014). *DNA bases thymine and adenine in bio-organic light emitting diodes*. **4**, 71.
- [۳] Behnia, S., Fathizadeh, S., & Akhshani, A. (2016). *DNA Spintronics: Charge and Spin Dynamics in DNA Wires*. **120(5)**, 2973-2983.
- [۴] Yakushevich, L. V. (2006). *Nonlinear physics of DNA*. John Wiley & Sons.
- [۵] Chen, Y. J., Groves, B., Muscat, R. A., & Seelig, G. (2015). *DNA nanotechnology from the test tube to the cell*. **10(9)**, 748.
- [۶] Carlson, R. (2009). *The changing economics of DNA synthesis*. **27(12)**, 1091.
- [۷] Gu, Q., Cheng, C., Gonela, R., Suryanarayanan, S., Anabathula, S., Dai, K., & Haynie, D. T. (2005). *DNA nanowire fabrication*. **17(1)**, R14.
- [۸] Malyshev, A. V. (2007). *DNA double helices for single molecule electronics*. **98(9)**, 096801.
- [۹] Holstein, T. (1959). T. Holstein, *Ann. Phys.(NY)* **8**, 325 (1959). *Ann. Phys.(NY)*, **8**, 325.
- [۱۰] Zhang, L. L., Xie, S. J., & Kang, D. W. (2017). *Role of photoresponse of π electrons in light-driven DNA dissociations*. **96(2)**, 022414.