

جایگزیدگی اسپینی در یک زنجیره پلیمری DNA در حضور اثرات حمام گرمایی

مصطفی سلیمی ، سهراب بهنیا ، سمیرا فتحی زاده

گروه فیزیک ، دانشکده علوم پایه ، دانشگاه صنعتی ارومیه

چکیده

سیستم‌های کوانتومی واقعی، به علت تأثیرات محیط‌های خارجی، سیستم‌های باز هستند. تمرکز سیستم‌های کوانتومی باز بر توصیف دینامیک غیر یکپارچه یک سیستم تعبیه شده در یک محیط بزرگتر (حمام) است. در مطالعه حاضر، با بکارگیری ابزارهای آشوب کوانتومی، به تحلیل جایگزیدگی اسپینی یک سیستم زیستی بر مبنای زنجیره DNA که متصل به الکترودهای فرومغناطیس و حمام حرارتی است می‌پردازیم. نتایج نشان دهنده جایگزیدگی اسپین و تغییرات آن نسبت به طول توالی DNA می‌باشد.

بررسی عملکرد سیستم‌های بیولوژیکی به دلیل ابعاد میکروسکوپی آنها، تحت دانش کوانتوم بیولوژی انجام می‌گیرد [۱]. فیزیکدان‌ها بیشتر علاقه‌مند به سیستم‌های پیچیده هستند، در این میان مولکول DNA به عنوان یک سیستم پیچیده بسیط در نظر گرفته می‌شود. از ویژگی‌های مولکول DNA، هزینه پایین در سنتز، قابلیت برنامه‌ریزی و انعطاف‌پذیری است که در تولید ساختارهای مولکولی و الکترونی-مولکولی مانند ترانزیستورها، سیم‌های نانو و دیودها کاربرد دارد. در بررسی خواص مختلف DNA نمی‌توان آن را به صورت یک سیستم منزوی در نظر گرفت. مدل حمام گرمایی موضوعی است که دارای اهمیت ویژه‌ای در زمینه‌های مختلف فیزیک مانند اطلاعات کوانتومی و نانوفیزیک است. حمام حرارتی می‌تواند نقش محیط را برای سیستم‌های مورد مطالعه ایفا کند و سیستم مورد مطالعه به صورت یک سیستم باز که با محیط (حمام) برهم کنش دارد مورد بررسی قرار گیرد. سیستم‌های کوانتومی باز در قسمت‌های مختلف از فیزیک مانند دستگاه‌های کوانتومی جدید و محاسبات کوانتومی مورد استفاده قرار می‌گیرد. از طرفی، سیستم‌های بیولوژیکی دارای رفتار هوشمندانه هستند یعنی نسبت به محرک‌های محیط به گونه‌ای پاسخ می‌دهند که بیشترین منفعت را برای بقایشان داشته باشد. بنابراین اهمیت محیط‌های مرتبط با سیستم‌ها و مولکول‌های بیولوژیکی و مطالعه این محیط‌ها برجسته می‌نماید. برای شبیه‌سازی اثرات محیطی روی DNA از ارتباط آن با حمام (در این مطالعه حمام حرارتی) بهره گرفته و با استفاده از ابزارهای آشوب کوانتومی به تحلیل یک سیستم زیستی مرتبط با محیط پرداخته شد.

با توجه به شکل (۱) مولکول DNA را در ارتباط با حمام حرارتی و الکترود قرار داده و هامیلتونی توصیف کننده کل سیستم بصورت زیر بیان می‌شود:

$$H_{SYS} = H_{DNA} + H_{Lead} + H_{Bath} + H_{DNA-Lead} + H_{DNA-Bath} \quad (1)$$

در رابطه (۱) جمله اول مربوط به هامیلتونی DNA است که بصورت زیر تعریف می‌شوند [۲]:

$$H_{DNA} = \sum_{i,j=1,2} \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} \varepsilon_{i,j} c_{i,j}^{+\sigma} c_{i,j}^{\sigma} + V_{i,i+1,j} c_{i+1,j}^{+\sigma} c_{i,j}^{\sigma} + \sum_{i,\sigma} \lambda_i c_{1,i}^{+\sigma} c_{2,i}^{\sigma} + \sum_{i,j} 2it_{so} \cos\theta (c_{i,j}^{+\uparrow} c_{i+1,j}^{\uparrow} - c_{i,j}^{+\downarrow} c_{i-1,j}^{\downarrow} - c_{i,j}^{+\downarrow} c_{i+1,j}^{\downarrow} + c_{i,j}^{+\uparrow} c_{i-1,j}^{\uparrow} + D_{i,i+1} c_{i,j}^{+\uparrow} c_{i+1,j}^{\downarrow} - D_{i,i+1}^* c_{i,j}^{+\downarrow} c_{i+1,j}^{\uparrow} + D_{i-1,i}^* c_{i,j}^{+\downarrow} c_{i-1,j}^{\uparrow} - D_{i-1,i} c_{i,j}^{+\uparrow} c_{i-1,j}^{\downarrow}) + H.c. \quad (2)$$

که j تعداد رشته‌ها و i ، تعداد سایت‌ها در هر رشته می‌باشند. $(c_{j,i}) c_{j,i}^{+\sigma}$ عملگر خلق (فنا) یک الکترون در سایت (j,i) ، $\varepsilon_{j,i}$ انرژی روی سایت الکترون، $t_{j,i}$ انتگرال پرش در یک رشته، λ_i اندرکنش بین زنجیره‌ای، θ زاویه ماریچ $\{ \sin[n\Delta\phi] + \sin[(n+1)\Delta\phi] + i \cos[n\Delta\phi] + i \cos[(n+1)\Delta\phi] \}$ و $D_{n,n+1} = it_{so} \sin\theta$ می‌باشد که ϕ زاویه پیچش است. جمله دوم در رابطه (۱) بیان کننده هامیلتونی الکترودها است [۲]:

$$H_{Lead} = \sum_{j=1,2} \sum_{k,\sigma} (\varepsilon_{L_{j,k}} + \frac{eV_b}{2}) a_{L_{j,k}}^{+\sigma} a_{L_{j,k}}^{\sigma} + \sum_{j=1,2} \sum_{k,\sigma} (\varepsilon_{R_{j,k}} - \frac{eV_b}{2}) a_{R_{j,k}}^{+\sigma} a_{R_{j,k}}^{\sigma} \quad (3)$$

که $(a_{\beta_{j,k}}) a_{\beta_{j,k}}^{+\sigma}$ با $\beta=L,R$ عملگر خلق (فنا) الکترون در الکترودها، β عملگر خلق (فنا) الکترون در الکترودها و V_b ولتاژ بایاس می‌باشد. هامیلتونی مربوط به برهم‌کنش مولکول DNA با الکترودها با رابطه زیر بیان می‌شود:

$$H_{DNA-Lead} = \sum_{j=1,2,k,\sigma=\uparrow\downarrow} (t_L a_{L_{j,k}}^{+\sigma} c_{i,j}^{\sigma} + t_R a_{R_{j,k}}^{+\sigma} c_{j,N}^{\sigma} + H.c.) \quad (4)$$

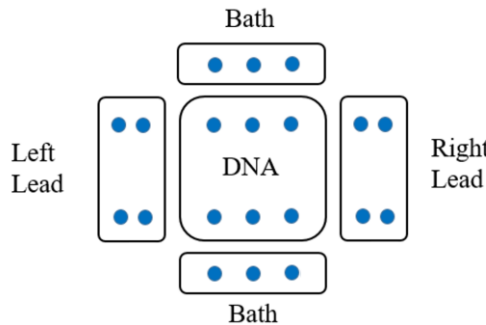
که t_{β} عناصر ماتریس تونل‌زنی از سایت k -ام الکترودها به زنجیره DNA می‌باشد. برای هامیلتونی حمام داریم [۳]:

$$H_{Bath} = \sum_{i=1}^N \hbar\omega_i b_i^+ b_i + 2 \sum_{i=1}^{N-1} \hbar\Omega_i (b_i^+ b_{i+1} + b_{i+1}^+ b_i) + H.c. \quad (5)$$

هامیلتونی جمله مربوط به برهم‌کنش حمام با مولکول DNA نیز با رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$H_{DNA-Bath} = \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} \sum_{j=1,2} t_i b_i^+ c_{i,j}^{\sigma} + H.c. \quad (6)$$

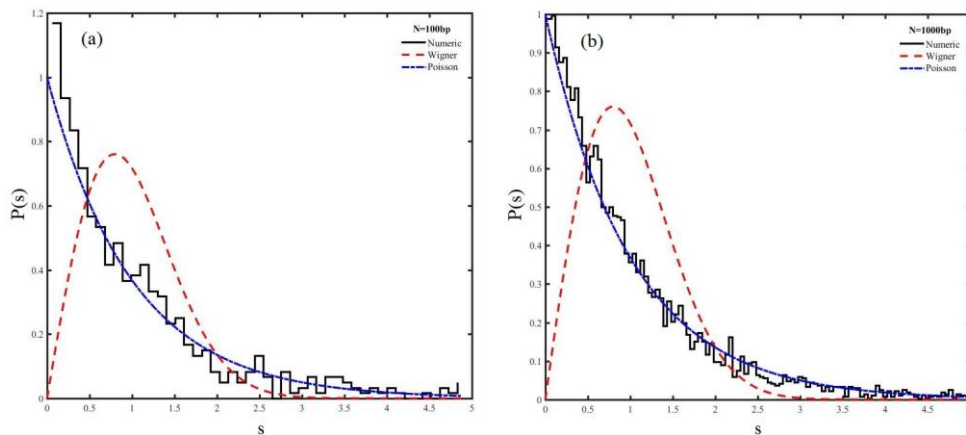
که t_i نیز عناصر ماتریس تونل‌زنی بین حمام و مولکول DNA می‌باشد.



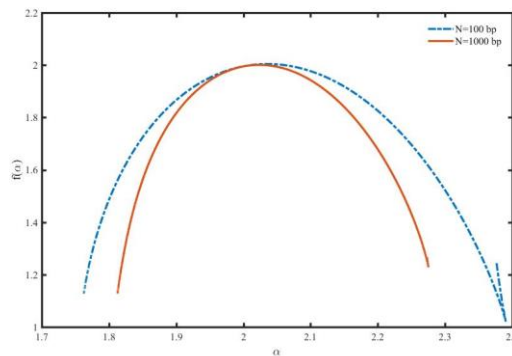
شکل ۱: تصویری از سیستم مورد مطالعه (مولکول‌های DNA در ارتباط با الکترودهای چپ و راست و حمام حرارتی)

در این مطالعه زنجیره مولکول DNA دو رشته‌ای بعنوان مولکول مرکزی با N سایت در نظر گرفته شده است که مطابق شکل (۱) از دو انتها به دو الکترودها با k سایت متصل و از بالا و پایین با حمام‌های حرارتی در ارتباط است. خواص آماری و تحلیل رفتار چنین سیستم‌هایی مطابق با نظریه ماتریس‌های تصادفی^۲ است [۴]. نوسانات طیفی، خواص انتقال و جایگزیدگی سیستم مورد مطالعه بر اساس این نظریه بررسی می‌شود.

یکی از پرکاربردترین ابزارها در مطالعه همبستگی طیفی، توزیع فاصله نزدیک‌ترین همسایگی $P(s)$ است که فاصله نزدیک‌ترین همسایگی با رابطه $s = E_{i+1} - E_i$ محاسبه می‌شود. با تحلیل ویژه توابع سیستم می‌توان گذارهای جایگزیده و ناجایگزیدگی سیستم را بررسی کرد [۵]. چند فرکتال بودن ویژه توابع با طیف یکتایی وابسته $f(\alpha)$ بررسی می‌شود که با رابطه $f(\alpha_q) = \alpha q - \tau(q)$ بیان می‌شود. در این رابطه نمای وزنی با رابطه $\tau(q) = D_q(q-1)$ مشخص شده و تابع $f(\alpha)$ بصورت تابع محدبی از α می‌باشد که بیشترین مقدار آن برای مقدار α_0 بدست می‌آید یعنی $f(\alpha_0) = d$. باریک شدن عرضی نمودار این تابع متناسب است با پخش‌شدگی تابع موج و برعکس [۶]. نمودار نزدیک‌ترین ترازهای مجاور بر حسب فاصله تراز در شکل (۲) بر حسب طول‌های متفاوت از زنجیره poly(AT) و در ولتاژ $V = 30V$ و فرکانس حمام $\frac{\omega}{\omega_c} = 5$ نشان داده شده است [۲]. هر دو شکل نشان دهنده جایگزیدگی سیستم برای اسپین کل ($S_i = S_i^{\uparrow} + S_i^{\downarrow}$) است. در تعداد جفت بازهای کمتر پیک مشخصه شنیرلمن^۴ در ابتدای نمودار به وضوح دیده می‌شود [۷]. با افزایش تعداد جفت بازها این پیک کاهش می‌یابد تا جائیکه در $N = 1000$ به کلی از بین می‌رود. حالت‌های پواسونی در شکل (۲) می‌تواند نشان دهنده حالت پایدار سیستم باشد. در تحلیل چندفرکتالی سیستم، شکل (۳) نتایج حاصل تایید می‌کند. باتوجه به شکل با افزایش طول توالی، عرض نمودار $f(\alpha)$ کمتر شده است که نشان دهنده کاهش میزان جایگزیدگی سیستم می‌باشد.



شکل ۲: تابع $P(s)$ زنجیره AT برای (a) ۱۰۰ جفت باز (b) ۱۰۰۰ جفت باز



شکل ۳: تابع $f(\alpha)$ برای تعداد جفت بازهای متفاوت

نتیجه گیری

در این بررسی سعی شده است که جایگزیدگی اسپینی در یک سیستم زیستی مورد مطالعه قرار گیرد. نتایج بدست آمده از تحلیل ترازهای نزدیک ترین همسایه و چندفرکتالی، جایگزیدگی سیستم را برای اسپین نشان می دهد. میزان جایگزیدگی اسپینی با تغییر طول توالی می تواند تغییر کند همچنین تحلیل چندفرکتالی نشان دهنده کاهش جایگزیدگی سیستم به ازای افزایش طول سیستم است.

مرجع ها

- [۱] Mohseni, M., Omar, Y., Engel, S., & Plenio, M. B. (Eds). (2014). *Quantum effects in biology*. Cambridge University Press.
- [۲] Fathizadeh, S., Behnia, S., & Ziaei, J. (2018). Engineering DNA Molecule Bridge between Metal Electrodes for High-Performance Molecular Transistor: An Environmental Dependent Approach. *The Journal of Physical Chemistry B*, **122(9)**, 2487-2494.
- [۳] Gutiérrez, R., Mandal, S., & Cuniberti, G. (2005). Quantum transport through a DNA wire in a dissipative environment. *Nano letters*, **5(6)**, 1093-1097.
- [۴] Guhr, T., Müller-Groeling, A., & Weidenmüller, H. A. (1998). Random-matrix theories in quantum physics: common concepts. *Physics Reports*, **299(4-6)**, 189-425.
- [۵] Mehta, M. L. *Random Matrices*; Academic Press: Boston, 1991; 523p.
- [۶] P. W. Anderson, Absence of diffusion in certain random lattices, *Physical Review*, **109, 5, 1492, 1958**.
- [۷] B.V. Chirikov, D.L. Shepelyansky, Shnirelman peak in level spacing statistics, *Phys. Rev. Lett.* **74 (1995) 518**.