

مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۲۳، شمارهٔ ۱، بهار ۱۴۰۲ DOI: 10.47176/ijpr.23.1.81549



سعیدہ محمدی و ایوب اسماعیل پور

دانشکده فیزیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجائی، تهران

پست الكترونيكي: s.mohammadi@sru.ac.ir

(دریافت مقاله: ۲۰ /۵۰ /۱۴۰۱ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۹/۱۶ / ۱۴۰۱ )

در این مقاله، ترابرد الکترونی برای یک سامانهٔ متشکل از مولکول DNA دورشته ای با توالی تلومریک متصل به دو الکترود نیمهمتناهی نانونوار سیلیسینی مورد مطالعه قرار گرفته است. این مطالعه، با استفاده از مدل تنگبست و رهیافت تابع گرین مورد بررسی قرار گرفته است. با قرار دادن مولکول DNA در وسط دو الکترود نانونوار سیلیسینی شاهد کانالهای عبور الکترون در سامانه هستیم و همچنین، نوع بازهای آلی متصل به الکترودها تأثیر به سزایی در ترابرد الکترونی سامانه را نشان دادند. محاسبات نشان می دهند که توالیهای تلومریک مانند: TTAGGG آلی متصل به الکترودها نسبت به بقیهٔ توالیها بیشترین رسانش الکتریکی را دارند. ما دریافتیم که با کنترل ولتاژ گیت (دروازه) در سامانه می توان جریان یا رسانش بار را کنترل کرد. همچنین، با افزایش تعداد جفت بازهای آلی در سامانه، شاهد افزایش جریان بودیم و با کنترل تعداد جفت بازهای آلی می توان ویژگیهای ترابردی را کنترل کرد. این توانایی کنترل، کاربرد فراوانی و نقش به سزایی در ساخت قطعات الکترونیکی دارد.

#### ۱. مقدمه

مولکول دی اوکسی ریبونوکلئیک اسید (DNA) ویژگیهای منحصربهفردی مانند: خاصیت خود تشخیص، خودساماندهی با خودآرایی دارد و ساختار ویژهٔ این مولکول باعث شده است که در طراحی مدارهای الکترونیکی مورد استفاده قرار گیرد [۱]. با اندازه گیری مستقیم رسانش از مولکول NA با اعمال یک ولتاژ بین دو رسانا مشخص شده است که بنابه شرایط، مولکول DNA رفتار الکترونیکی متفاوتی از جمله: عایق، هادی اهمی و نیمهادی از خود نشان میدهد [۲]. در علم الکترونیک مولکولی، مولکولهایی مانند: مولکولهای کوچک، پلیمرو مولکول DNA میتوانند بهعنوان جزئی از یک

مدار قرار گیرند. مولکول DNA، چهار باز آلی شامل: آدنین، گوانین، سیتوزین و تیمین دارد [۳]. از دیدگاه مکانیک کوانتومی، در مولکول DNA، الکترونها از یک باز آلی به باز آلی بعدی انتقال مییابند که این امر عبور بار را در طول مولکول DNA امکانپذیر میکند. در تئوری روش ترابرد بار اثبات شده است که ترابرد بار شدیداً به بازهای آلی مولکول DNA وابسته است [۴]. در مولکول DNA دورشتهای بازهای آلی آدنین و تیمین دو پیوند هیدروژنی و بازهای گوانین با گوانین سه پیوند هیدروژنی دارند. بنابراین، جفت باز گوانین – سیتوزین میتواند ترابرد بار قوی نسبت به آدنین– تیمین داشته باشند. مطالعات تئوری و تجربی نشان دادند که گوانین نقش به سزایی در ترابرد بار در مولکول DNA دارد

زيرا گوانين كمترين انرژي يونيزاسيون نسبت به بقيهٔ بازهاي DNA را دارد [۵ و ۶]. در نتيجه، در حالت کلی می توان گفت که انتقال بار الکتریکی در مولکول DNA ناشی از جفت بازهای گوانین با سیتوزین است و جفت بازهای آدنین – تیمین در نقش سد پتانسیل عمل میکنند. بنابراین، هر چه فاصلهٔ جفت بازهای گوانین با سیتوزین در یک مولکول DNA زیادتر باشد، انتقال بار الکتریکی در این مولکول کمتر میشود. در تقريب تنگبست مدل های فيزيکی مانند: يک بعدی، دو کاناله، استخوان ماهی و نردبانی برای مولکول DNA پیشنهاد شده است [۷] که مدل نردبانی ترکیبی از مدل دوکاناله و استخوان ماهی است. همان گونه که بیان شد شرایطی که در آن ترابرد الكتروني مولكول DNA بررسي مي شود، در رفتار الكترونيكي این مولکول تأثیر به سزایی دارد. در نتیجه، منطقی به نظر می-رسد که برای استفاده مولکول DNA در مدارهای الکترونیکی بهدنبال ساختارهایی باشیم که در آن سامانه، این مولکول رفتار یک رسانا یا نیمرسانا را به نمایش بگذارد. یکی از مهیج ترین راهحلها برای این موضوع، اتصال این مولکول با دستگاههای مبتنی بر ألوتروپهای كربن است [۸]. ما در مقالهٔ قبلی خود که رسانش الکتریکی یک مولکول DNA عبوری از یک نانوحفره را بررسی کردیم به این نتیجه دست یافتیم که نانونوار سیلیسین گاف انرژی بسیار بزرگتر نسبت به گرافین (در این شرایط) دارد [۹]. همچنین، یک پژوهش ترابرد الکترونی برای این مولکول را در نانوحفرهٔ سیلیسین بررسی کردند. آنها نشان دادند که سیلیسین شرایط مناسبی برای اتصال با مولكول DNA دارد [١٠]. سيليسين ساختار لانه-زنبوری از اتمهای سیلیکون دارد که بهدلیل داشتن قدرت اسپین – مدار ذاتی قوی یک ساختار مناسب برای قطعات الكترونيكي است [١١]. همچنين، اين ماده بهدليل دارا بودن پیوند sp<sup>r</sup> توانایی ایجاد پیوند قوی با بازهای آلی DNA را دارد. بنابراین، برای آشکارسازی بازهای آلی DNA از این ماده مي توان استفاده كرد [١٢]. در اين مقاله، ما رسانش الكتريكي مولکول DNA با مدل نردبانی که به دو الکترود سیلیسینی متصل است را بررسی میکنیم. با توجه به مطالب بیان شده، ما باور داریم که اتصال نانونوارهای سیلیسین بهعنوان یک

اتصال بالقوه با مولکول DNA ، امکان طراحی مدارهای الکترونیکی را فراهم میکند.

### ۲. مدل و روش

در این پژوهش، با استفاده از مدل تنگبست و مدل نردبانی مولکول DNA، هامیلتونی برای مولکول DNA بیان می شود. در ادامه، برای بررسی ترابرد الکترونی مولکول DNA، این مولکول به دو الکترود که شامل نانونوارهای سیلیسینی است، متصل می شود. این سامانه نیز به ولتاژ دروازه متصل می شود. در شکل ۱ این سامانه نمایش داده شده است.

#### DNA ....۲. مدل تنگبست

ابتدا، با مدل تنگبست هامیلتونی DNA دو رشته ای برای رشتهٔ اول به صورت زیر بیان می شود [۹، ۱۳ و ۱۴]:  $H_{s_{1}} = \varepsilon_{G} b_{1}^{\dagger} b_{1} + \sum_{i=n-\tau}^{j+1} \varepsilon_{G} b_{i}^{\dagger} b_{i} + t_{||} \sum_{i=1}^{n-1} [b_{i}^{\dagger} b_{i+1} + h.c.], \quad (1)$ و رشتهٔ دوم

$$H_{s_{\tau}} = \varepsilon_{C} c_{n+1}^{\dagger} c_{n+1} + \sum_{i=N-\tau}^{N} \varepsilon_{C} c_{i}^{\dagger} c_{i}$$

$$+ t_{\parallel} \sum_{i=n+1}^{N-1} [c_{i}^{\dagger} c_{i+1} + h.c.], \qquad (\Upsilon)$$

و برهمکنش دو رشته با هم

$$H_{s_1+s_1} = t_\perp \sum_{i=1}^n [b_i^{\dagger} c_i + h.c.], \qquad (\Upsilon)$$

در معادلههای (۱) تا (۳) متغیرها به این صورت تعریف می شوند:  $h_{\Lambda}^{\dagger} e_{i} h_{\Lambda} e_{i} a$  مملگرهای خلق و فنای الکترونها در اولین رشته DNA در سایت *i* و (<sub>i</sub>) $f_{i}^{\dagger}$  عملگرهای خلق و فنای الکترونها در رشتهٔ دوم DNA را نشان می دهد، فنای الکترونها در رشتهٔ دوم AnA را نشان می دهد، مانند (eV)  $0^{*} \circ =_{\Pi} h_{\Lambda} i_{2} c$  مجاور هم، مانند  $T - A e G - G = (Va) 0^{*} \circ \circ =_{1} h_{\Lambda} i_{2} c$  مجاور هم، مانند باز آلی عمود برهم مانند: T - A e G - G است. انرژی های جایگاهی برای بازهای آلی برابر با (Va) (eV) م جایگاهی برای ایزهای آلی برابر ای (Va) (eV) م جایگاهی ای ای از (eV) (eV) م جایگاهی ای از (eV) م دورشته ای با (Va) (eV) م الکترودهای نیمه متناهی متصل می شود.



**شکل ۱**. نمایی از مولکول DNA دو رشتهای مدل نردبانی در تقریب تنگبست متصل به دو الکترود نیمهمتناهی سیلیسینی همراه با نمایش انرژی جهش بین بازهای آلی.

۲. ۲. مدل تنگبست نانونوار سیلیسینی

حال، هامیلتونی نانونوار سیلیسین در مدل تنگبست را با در نظر گرفتن برهمکنش بین همسایههای اول و دوم بهصورت زیر می توان نوشت [۱۵ و ۱۶]:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \alpha} e^{\dagger}_{i\alpha} e_{j\alpha} + i \frac{\lambda_{so}}{r \sqrt{r}} \sum_{\langle \langle ij \rangle \rangle} v_{ij} e^{\dagger}_{i\alpha} \sigma^{z}_{\alpha\beta} e_{j\beta} +$$

$$\sum_{i,\alpha}^{N} V_{i} \eta_{i} e^{\dagger}_{i\alpha} e_{j\alpha} + M \sum_{i,\alpha} e^{\dagger}_{i\alpha} \sigma^{z} e_{j\alpha}$$

$$-i \frac{r}{r} \lambda_{R} \sum_{\langle \langle ij \rangle \rangle} \mu_{ij} e^{\dagger}_{i\alpha} (\sigma \times d^{\circ}_{ij})^{z}_{\alpha\beta} e_{j\beta}$$

$$+i \lambda_{R} (E_{z}) \sum_{\langle \langle ij \rangle \rangle} e^{\dagger}_{i\alpha} (\sigma \times \hat{d}_{ij})^{z}_{\alpha\beta} e_{j\beta},$$
(\*)

در معادلهٔ (۴) متغیرها به صورت زیر تعریف می شوند:  $\alpha_{i\alpha}(i)$ عملگرهای فنا (خلق) الکترونها با اسپین  $\alpha$ ، که می تواند یا  $\downarrow$  باشد. در نقطهٔ  $\overline{R}_i$ ,  $\langle ij \rangle e_i \langle \langle ij \rangle \rangle$  به ترتیب جهش بین اولین و دومین همسایه ها'، ( $i \rangle e_i \rangle e_i \rangle$  به ترتیب مهش بین برهم کنش اسپین - مدار ذاتی، ( $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z = \sigma_i R$  [20] قدرت پائولی،  $1 \pm e_{ij}$  برای حرکت ساعتگرد و پادساعتگرد انرژی جهش،  $I = e E_i$  پتانسیل الکتریکی که  $R + e_i e_j R$  (e R) و میدان الکتریکی ( $R + e_i e_j R$ ) مانونوار

سيليسيني، ا $\eta_i=\pm 1$  براي زير شبكهٔ A و B، شدت ميدان تبادلى  $M_z = \tau \lambda_{so}$ ، شدت اسپين– مدار راشبا با است. جملهٔ اول، جهش بین همسایه های اول  $\lambda_R = \circ_V (meV)$ با انرژی (t = 1,8(eV) است، جملهٔ دوم، برهم کنش اسیین – مدار ذاتی بین همسایه های دوم را نشان می دهد. جملهٔ سوم، مربوط به پتانسیل است که در اثر اعمال میدان الکتریکی عمود بر سطح ، بين دو زيرشبكة A و B به وجود مي آيد. جملة چهارم  $E_z$ مغناطش تبادلی را نشان میدهد که میزان تبادلی Mz ممکن است در اثر مجاورت سیلیسین با یک فرومغناطیس مانند رشد اتمهای آهن به سطح سیلیسین یا رشد سیلیسین روی یک زيرلايهٔ عايق فرومغناطيس ً بهوجود مي آيد [١٧]. جمله هاي پنجم و ششم، برهمکنش اسپین- مدار راشبا (  $\lambda_{R}$  ) بین همسایههای اول و دوم را نشان میدهد که  $\mu_{ii} = +1$  برای B اتمهای زیرشبکهٔ A و -1 =  $\mu_{ij}$  برای اتمهای زیرشبکهٔ Aو همچنین،  $\left| \vec{d}_{ij} - \vec{d}_{ij} \right|$  بردار یکه در جهت برداری است که و  $v_{ij} = (\vec{d}_i \times \vec{d}_j) / |\vec{d}_i \times \vec{d}_j|$  اتمهای i و j و i را به متصل می کند، و iکه  $\overrightarrow{d_i}$  و  $\overrightarrow{d_i}$  نزدیکترین پیوندهایی هستند که همسایههای دوم را به هم متصل مي کنند.

### ۲. ۳. روش تابع غیرتعادلی گرین

برای مطالعهٔ رسانش الکترون و جریان برای سامانهٔ مورد مطالعه از روش تابع گرین استفاده می شود. تابع گرین در زیر فضای قطعه بهصورت زیر است [۸۸]. (۵)  $G_{S}(E) = [(E+i\eta)I - H_{DNA} - U - \Sigma_{L} - \Sigma_{R}]^{-1}$ , (۵) در رابطهٔ (۵)،  $H_{DNA}$  هامیلتونی رشتهٔ DNA،  $\eta$  یک مقدار خیلی در رابطهٔ (۵)،  $H_{DNA}$  هامیلتونی رشتهٔ Zet انرژی های الکترود کوچک، U پتانسیل دروازه و  $(R_{L})_{L}$  خود انرژی های الکترود  $\Sigma_{L} = H^{+}_{\cdot,1} g^{L}_{\cdot,\cdot} H_{\cdot,1}$  (۶)  $\Sigma_{R} = H^{+}_{\cdot,1} g^{R}_{\cdot,\cdot} H_{\cdot,1}$  (۷)  $\Sigma_{R} = H^{+}_{\cdot,1} g^{R}_{\cdot,\cdot} H_{\cdot,1} H^{+}_{\cdot,1}$  (۷)  $\Sigma_{R} = I^{+}_{\cdot,1} g^{R}_{\cdot,\cdot} H_{\cdot,1} - I^{+}_{\cdot,\cdot} T^{-}_{-,\cdot} T^{-}_{\cdot,\cdot} T^$ 

$$g_{M+1,M+1}^{R} = [(E+i\eta)I - H_{,,*} - H_{-1,*}^{\dagger}T]^{-1}, \qquad (\mathbf{q})$$

<sup>1</sup> Nearest/next-nearest-neighbor Hopping

<sup>2</sup> Ferromagnetic Insulating Substrate

سعیدہ محمدی و ایوب اسماعیل پور



**شکل ۲**. نمودار جریان بر حسب ولتاژ برای توالیهای مختلف تلومریک در ولتاژ دروازه (V<sub>g</sub> = ۹٫۸(eV.

در معادلههای (۸) و (۹)، M تعداد سلولهای واحد در سامانه، ... H و  $...^{\dagger}_{-H}$  به ترتیب هامیلتونی یک سلول واحد و هامیلتونی بین دو سلول واحد در الکترودها هستند. در معادلات بالا T و  $\tilde{T}$  از روابط برگشت پذیر زیر به دست می آید [۱۳، ۱۹ و ۲۰]:

$$T = t_{\circ} + t_{\circ} t_{1} + t_{\circ} t_{1} t_{1} + \dots + t_{\circ} t_{1} t_{1} \dots t_{n}, \qquad (1 \circ)$$

$$\widetilde{T} = t_{\cdot} + t_{\cdot} t_{1} + t_{\cdot} t_{1} t_{\tau} + \dots + t_{\cdot} t_{1} t_{\tau} \dots t_{n}, \qquad (11)$$

$$t_{i} = (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} t_{i-1}^{Y}, \qquad (1Y)$$

$$\tilde{t}_{i} = (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} \tilde{t}_{i-1}, \qquad (1\mathbf{\tilde{r}})$$

$$t_{\bullet} = [(E + i\eta)I - H_{\bullet,\bullet}]^{-1} H_{-1\bullet}^{\dagger}, \qquad (1\%)$$

$$\tilde{t}_{\cdot} = [(E+i\mu)I - H_{\cdot,\cdot}]^{-1} H_{-1\cdot}, \qquad (1\Delta)$$

با استفاده از معادلههای بالا میتوان عبوردهی الکترون را به-صورت زیر نوشت [۱۸]:

$$T(E) = Tr[\Gamma_L G_S^{\dagger} \Gamma_R G_S], \qquad (19)$$

$$\Gamma_{L(R)}(E) = i[\Sigma_{L(R)}^{\dagger}(E) - \Sigma_{L(R)}(E)].$$
(1V)

با استفاده از صورتمندی لاندائو، رسانش با رابطهٔ با استفاده از صورتمندی لاندائو، رسانش با رابطهٔ  $G = (re^r/h)T(E_F)$ . سطوح فرمی در منبع و تخلیه بهترتیب برابر با  $\mu_s = E_F$  و  $\mu_s = E_F + eV_D$  است. پتانسیل دروازه U، که به ما امکان مدلسازی اثرات شارژ را در حضور ولتاژ سوییده می دهد مدلسازی اثرات شارژ را در حضور ولتاژ سویده می دهد ایان شود؛ با این فرض که با اعمال ولتاژ سوییده بین الکترودها توزیع مجدد بار

در حالت کلی، جریان به صورت زیر بیان می شود:  

$$I = \frac{\tau e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E) [f_s(E) - f_D(E)] dE \qquad (1\Lambda)$$
در محدودهٔ دماهای پایین،  $k_B T = k_D \gg k_B T$  در محدودهٔ دماهای پایین،  $|e| V_D = \mu_s - \mu_D \gg k_B T$  داریم (1,  $e| V_D = \Theta(\mu_{S,D} - E)$  که  $\Theta$  تابع پلهای است.

بنابراین، جریان را می توان به صورت زیر بازنویسی کرد [۲۲]:  

$$I = -\frac{\tau e}{h} \int_{\mu_s}^{\mu_D} T(E) dE.$$
(۱۹)

#### ۳. بحث و بررسی نتایج

برای بررسی ترابرد کوانتومی در توالی تلومریک'، نقش تغییرات احتمالی در محل اتصال به نانونوار سیلیسین مورد مطالعه قرار می گیرد. در پژوهش های قبلی نشان داده شده است که در توالی تلومريک پلههاي قويتري وجود دارد که همان کانالهاي عبور الکترون است، این امر بهدلیل این است که هر نوار انرژی به چندین زیر نوار تقسیم می شود [۲۳]. به همین منظور در این مقاله، از توالی تلومریک برای بررسی ترابرد الکترونی استفاده مي شود. در اين مقاله، ما سه هدف را دنبال مي كنيم. اولي مربوط به تأثیر و وابستگی جفت بازهای آلی توالی تلومریک است که به نانونوار سیلیسین متصل شدهاند. دومی، مربوط به وابستگی ویژگیهای الکتریکی سامانه به ولتاژ دروازه است. هدف سوم تأثير تعداد جفت بازهاي آلي در رسانش الكتروني سامانه است. در شکل ۲، نمودار جریان برحسب ولتاژ دروازه برای توالی تلومريک متفاوت نشان داده شده است. در اين نمودار توالي-هاى GGGTTA ،AGGGTT ،TAGGGT ،TTAGGG، GGTTAG و GTTAGG مورد بررسی قرار می گیرد. همان طور که گفته شد این توالیها به دو الکترود نیمهمتناهی نانونوار سیلیسینی از طریق انرژی جهش ۲ متصل شده است. در نمودار جریان بر حسب ولتاژ مشاهده می شود که یک گاف انرژی در ولتاژهای آستانه در سامانه مشاهده می شود که این بهدلیل وجود بازهای آلی در قطعهٔ مرکزی است [۷]. در واقع، وجود نوکلوتیدهای DNA یک گاف انرژی را بین بالاترین و پايينترين اوربيتال مولكولي اشغال نشده باز ميكند، كه در

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Telomeric Sequence

شکل ۲ برای منحنیهای *I-V* نشاندهندهٔ ولتاژ آستانه است [۲۴]. در این نمودار، ولتاژ دروازه برابر ۹٫۸ الکترون ولت ا می شود که این امر باعث ( $V_e = {\sf q}_{\Lambda} (eV)$ ) در نظر گرفته می شود که این امر  $(V_e)$ می شود که انرژی فرمی نزدیک به نصف گاف انرژی فرض شود. همچنین، این نتایج برای تعداد جفت بازهای آلی برابر با ۱۲ نمایش داده شده است. برای ولتاژهای اعمال شده به اندازهٔ کافی بالا، کل نوارهای در محدودهٔ انرژی فرمی نمایش داده می شود که منجر به اشباع جریان در این محدوده می شود. همانطور که از شکل مشخص است پلههایی مشاهده میشود که این پلهها نشاندهندهٔ کانالهای عبور الکترون است. در این شکل مشاهده می شود که بیشترین احتمال عبور مربوط به توالى هاى TTAGGG ، TAGGGT و GTTAGG است. وقتى جریان برای مدلهای مختلف بررسی می شود، مشاهده میکنیم که هر پله دارای یک انرژی یکسان است، اگرچه دامنهٔ پلهها متغیر است. در این شکل، یک حساسیت قوی جریان تونلزنی شده بر حسب ولتاژ دروازه برای توالی های متفاوت مشاهده شد.

پلهها یا کانالهای عبور در شکل ۲ مرتبط با تشدیدها یا قلهها در نمودار رسانش الکترون است (که در شکل ۳ نمایش داده شده است) . این قلهها احتمال عبور الکترون را به نمایش می-گذارند. چنین تشدیدهایی در توالی تلومریک بهدلیل مجزا شدن یک نوار انرژی به چنین زیرنوار انرژی قوی است. همان طور که مشاهده می شود در این محدودهٔ رسانش، الکترون برای توالیهای GTTAGG ،GGGTTA ،TAGGGT و TTAGGG بیشتر است. بنابراین، ما دریافتیم که با انتخاب نوع باز آلی که به الکترودها متصل است می توان احتمال عبور را برای یک انرژی معین تغییر داد. پس، از نمودارهای ۲ و ۳ درمی یابیم که بسته به نوع بازهای آلی که به نانونوار سیلیسین متصل هست،

این پیوند می تواند قوی باشد. بنابر مرجع [۱۴] باز آلی T یک سد انرژی برای انتقال بار تشکیل می دهد در حالی که بار از طریق بازهای آلی G انتقال می یابد، که در این صورت انرژی-های هر باز آلی با خودش نزدیک به انرژی فرمی در الکترودها هستند.

حال، به منظور نمایش بهتر تأثیر ولتاژ دروازه بر ویژگی های الکتریکی سامانه، نمودار جریان بر حسب ولتاژ برای ولتاژهای دروازه متفاوت برای دو توالی GGGTTA و TTAGGG و TTAGGG و بررسی می شود. در شکل ۴ برای (eV)  $A = {}_{g}V$  مشاهده می شود که در جاهایی که  $V_{D}$  منفی است، جریان پایین تری را نشان می دهد. این امر به دلیل احتمال انتقال کمتر برای اوربیتال های مولکولی اشغال شده در مقایسه با اوربیتال های مولکولی اشغال نشده است [۲]. همچنین، این امر را می توان ناشی از جریان های اشباع در نمودار جریان – ولتاژ با محدودهٔ انرژی فراتر از نوارهای عبور الکترون مرتبط دانست. همچنین، برای ولتاژهای دروازه برابر با ۶ و A۹ الکترون ولت در قسمت  $V_{D}$  منفی، جریان الکتریکی بیشتر نسبت به ۸ الکترون ولت مشاهده می شود. اگر در شکل ۴ دقت شود مشاهده می شود که با کنترل کنترل کرد.

در ادامه به مطالعهٔ تأثیر تعداد جفت بازهای آلی برابر با ۱، ۴ و ۱۲ در قطعهٔ مرکزی که متصل به دو الکترود نیمهمتناهی سیلیسین است، خواهیم پرداخت (شکل ۵). در این شکل ما شاهد این هستیم که با افزایش تعداد جفت بازهای آلی ساختار پلهای یا همان جریان عبوری الکترون افزایش یافته است. همچنین، در این حالت، مشاهده می شود که با کنترل تعداد جفت بازهای آلی متصل به الکترودهای سیلیسینی گاف انرژی قابل کنترل است.

جلد ۲۳، شمارهٔ ۱

سعیدہ محمدی، ایوب اسماعیل پور

TAGGGT TTAGGG G(E) 5 AGGGTT GGGTTA 4 (E) 3 2 2 1 0 GGTTAG GTTAGG G(E) -1.0 -0.5 0.0 0.5 1.0 -1.5 E(t)

**شکل ۳**. رسانش الکتریکی بر حسب انرژی الکترون برای توالیهای متفاوت تلومریک که ولتاژ دروازه برابر با (eV) (eV) در نظر گرفته شده است.

E(t)



شکل ۴. جریان الکتریکی بر حسب ولتاژ برای ولتاژ دروازههای متفاوت در توالیهای GGGTTA و TTAGGG و



شکل ۵. نمودار جریان بر حسب ولتاژ برای تعداد متفاوتی از جفت بازهای آلی با ولتاژ دروازه (V<sub>g</sub> = ۹٫۸(eV) برای توالی TTAGGG.

### 47

دادند. با تغییر در ولتاژ دروازه، ما شاهد جریان کمتری در  $V_{
m D}$ 

### ۴. نتیجه گیری

منفی برای ولتاژ دروازه برابر ۸ بودیم. این امر ناشی از احتمال در این پژوهش، با استفاده از مدل تنگبست و رهیافت تابع عبور الکترون کمتر برای اوربیتالهای مولکولی اشغال شده در گرین به مطالعهٔ ترابرد الکترونی مولکول DNA دو رشتهای مدل مقایسه با اوربیتالهای مولکولی اشغال نشده است. همچنین، با نردبانی با توالی تلومریک متصل به دو الکترود نیمهمتناهی كنترل ولتاژ دروازه در سامانه مي توان رسانش الكترون به عبارت نانونوار سيليسيني يرداخته مي شود. در اين يژوهش، با قرار دادن دیگر ترابرد الکترونی را کنترل کرد. در ادامه، تأثیر تعداد جفت بازهای آلی در وسط دو الکترود سیلیسینی شاهد پلههایی در بازهای آلی در داخل قطعهٔ مرکزی بررسی شد که مشاهده شد نمودار جريان - ولتاژ شديم كه اين پلهها همان كانالهاي عبور با افزایش تعداد این جفت بازهای آلی جریان الکتریکی افزایش الکترون را به نمایش می گذارد. نوع توالی و نوع جفت بازهای ييدا مي كند. همچنين، با كنترل تعداد اين جفت بازها مي توان آلي متصل به الکترودها تأثیر بهسزایي در رسانش الکتریکي را گاف انرژی را کنترل کرد. بنابراین، با استفاده از این توانایی نشان داد. از بین توالی های مورد مطالعهٔ سه توالی TAGGGT، کنترل می توان گام بزرگی در طراحی ساخت مدارهای TTAGGG و GTTAGG ترابرد الكتريكي بالايي را نمايش الكتريكي و قطعات الكتروني برداشت.

مراجع

- 1. D Porath, N Lapidot, and J Gomez-Herrero, "Charge transport in DNA-based devices, in Introducing Molecular Electronics", Springer (2006).
- 2. C J Paez, P A Schulz, N R Wilson, and R A Romer, New J. Phys. 14 (2012) 093049.
- 3. H Lodish, A Berk, C A Kaiser, M Krieger, M P Scott, A Bretscher, H Ploegh, and P Matsudaira, *"Molecular Cell Biology"*, Biological Sciences, 6th Edition, (2000).
- 4. R G Endres, D L Cox, and R R Singh, Rev. Mod. Phys. 76, 1 (2004) 195.
- 5. D Umadevi and G N Sastry, J. Phys. Chem. Lett. 2 (2011) 1572.
- 6. D Le, A Kara, E Schroder, P Hyldgaard, and T S Rahman, J. Phys. Condens. Matter. 24 (2012) 424210.
- 7. G Cuniberti, L Craco, D Porath, and C Dekker, Phys. Rev. B 65, 24 (2002) 241314.
- 8. S Akca, A Foroughi, D Frochtzwajg, and H W C Postma, PLoS ONE 6 (2011) 18442.
- S Mohammadi, F Khoeini, M Esmailpour, A Esmailpour, and M Akbari-Moghanjoughi, *Chem. Phys.* 541 (2021) 111048.
- 10. H Sadeghi, S Bailey, and C J Lambert, Appl. Phys. Lett. 104, 10 (2014) 103104.
- 11. H Ma, M Liu, L Wen, Q Li, H Chen, and X Yi, Results Phys. 20 (2021) 103752.
- 12. T H Osborn and A A Farajian, Nano Res. 7, 7 (2014) 945.
- 13. S Mohammadi, F Khoeini, M Esmailpour, and M Khalkhali, Superlattice. *Microst.* 130 (2019) 182.
- 14. N V Grib, D A Ryndyk, R Gutierrez, and G Cuniberti, J. Biophys. Chem. 1 (2010) 20.
- 15. S Mohammadi, A Phirouznia, and M Esmailpour, *Phys. E Low-dimens. Syst. Nanostruct.* **133** (2021) 114803.
- 16. K Shakouri, H Simchi, M Esmaeilzadeh, H Mazidabadi, and F M Peeters, Phys. Rev. B 92 (2015) 035413.
- 17. M Ezawa, Phys. Rev. Lett. 109 (2012) 055502.
- 18. S Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems", Cambridge University Press, Cambridge, England, 1995. "Quantum Transport: Atom to Transistor", Cambridge University Press, England, (2005).
- 19. M P L Scancho, J M L Sancho, and J Rubio, Phys. F: Met. Phys. 14 (1984) 1205.
- 20. T C Li and S P Lu, Phys. Rev. B 77 (2008) 085408.
- 21. P Damle, T Rakshit, M Paulsson, and S Datta, IEEE Trans. Nanotechnol. 1 (2002) 145-53.
- 22. S Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems", Cambridge: Cambridge University Press (1999).
- 23. D K Klotsa, R A Romer, and M S Turner, Biophys. J. 89 (2005) 2187.

جلد ۲۳، شمارهٔ ۱

24. M Kitayner, H Rozenberg, R Rohs, O Suad, D Rabinovich, B Honig, and Z Shakked, *Nature Structural & Molecular Biology*, **17**, 4 (2010) 423.

