

## تابش نور و ترابرد الکترونیکی در زنجیره DNA

## خلاصه

**مقدمه:** ویژگی‌های اپتوالکترونیکی مواد زیستی از زمینه‌های مطالعاتی نوظهور در حال پیشرفت است. در طی سال‌های متمادی، DNA به دلیل اینکه نسبت به جریان بار و اسپین خاصیت رسانایی از خود نشان داده است، در ساختارهای نانوالکترونیک مورد توجه قرار گرفته است. **روش بررسی:** در این کار سعی کرده‌ایم از DNA به عنوان یک مولکول زیستی برای طراحی یک سویچ اپتیکی و بررسی خواص اپتیکی غیرخطی استفاده کنیم. در این راستا از توالی طبیعی ژنوم ویروس دلتای هپاتیت<sup>۱</sup> استفاده شده است تا بتوان از خاصیت سازگاری با بدن انسان بهره برد. در این مطالعه از مدل PBD به انضمام مدل نردبانی CL برای بررسی سیستم با استفاده از رهیافت آشوب استفاده کرده‌ایم.

**یافته‌ها:** سری زمانی جریان الکتریکی عبوری نشان‌دهنده رفتار غیر خطی توالی ویروس می‌باشد. همچنین با بررسی جریان برحسب دامنه نور فرودی، محدوده‌هایی که در آن سیستم نسبت به جریان فرودی حساسیت بالایی دارد، مشخص می‌شود و با مطالعه نمودار مشخصه جریان-ولتاژ می‌توان محدوده‌ای که در آن پدیده اهمی و مقاومت دیفرانسیلی منفی آشکار می‌شود را مشخص کرد. همچنین محدوده دمایی که در آن سیستم رفتار بهینه‌ای از خود به نمایش می‌گذارد، مشخص می‌شود.

**نتیجه‌گیری:** با تغییر فرکانس و دامنه نور فرودی پاسخ الکتریکی زنجیره DNA به تابش نور بررسی شده است. در مقدار دامنه نور  $A_0 = 0.3 \left( \frac{hc}{e r_0} \right)$  و  $A_0 = 0.6 \left( \frac{hc}{e r_0} \right)$  به ترتیب شاهد عبور بیشترین و کمترین جریان الکتریکی از سیستم هستیم. سری زمانی جریان عبوری از DNA می‌تواند رفتار این سیستم با گذر زمان را نشان دهد که با افزایش زمان اندازه‌گیری، شاهد رفتار غیرخطی سیستم خواهیم بود. با افزایش دمای محیط در حالت کلی شاهد سیر نزولی جریان عبوری هستیم تا جایی که در دمای ذوب (۳۵۵ K) کمترین جریان از سیستم عبور می‌کند و تقریباً می‌توان گفت سوییچ در حالت خاموش قرار می‌گیرد. از سوی دیگر، نمودار مشخصه I-V مناطق شبه اهمی و DNA را نشان می‌دهد که عرض این نواحی در محدوده‌های ولتاژ متفاوت تغییر می‌کند.

**واژه‌های کلیدی:** اپتوالکترونیک، دی‌ان‌ای، منحنی مشخصه جریان-ولتاژ، مقاومت شبه‌اهمی، مقاومت دیفرانسیلی منفی

سمیرا فتحی زاده<sup>۱</sup>  
الهه جوانشور<sup>۲</sup>  
سهراب بهنیا<sup>۳</sup>  
فاطمه نعمتی<sup>۴</sup>

۱. استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران
۲. دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران
۳. استاد تمام، گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران
۴. دانشجوی دکتری، گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران

نویسنده مسئول: سمیرا فتحی زاده. تلفن: ۰۹۱۴۳۹۱۳۴۹۳  
پست الکترونیک: s.fathizadeh@sci.uut.ac.ir

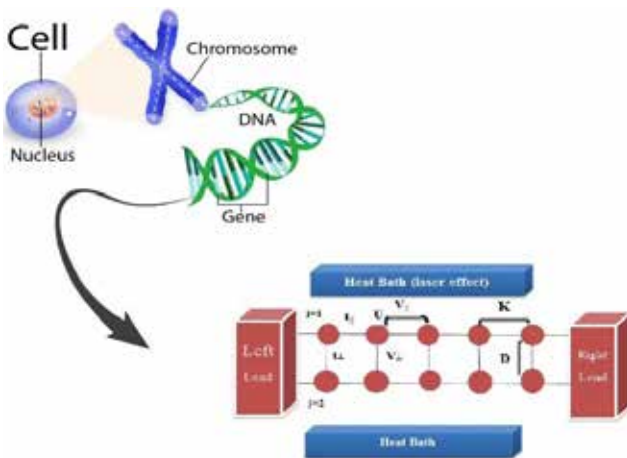
## مقدمه

در میان پیشرفت‌های برجسته اخیر، لیزر<sup>۱</sup> جایگاهی رفیع به خود اختصاص داده است. سازوکارهای متفاوتی نظیر برهمکنش گرمایی به هنگام پرتودهی نور لیزر بر بافت بیولوژیک روی می‌دهد [۱]. برهمکنش گرمایی به کلیه آثاری اطلاق می‌شود که افزایش دمای موضعی پارامترهای متغیر در آن باشد. این آثار گرمایی می‌توانند به وسیله لیزرهای پالسی یا موج پیوسته ایجاد شوند [۲]. برهمکنش گرمایی از جمله واکنش‌هایی است که هنگام تابش لیزر بر روی سیستم‌های بیولوژیک ایجاد می‌شود و در لیزر پزشکی به‌ویژه در جراحی لیزری<sup>۲</sup> کاربرد به‌سزایی 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 به‌طور گسترده‌ای در علوم پزشکی و زیستی به‌کار برده می‌شود [۳]. اخیراً تحقیقات تجربی بسیاری روی مواد آلی از جمله گرافن برای بررسی خواص اپتیکی و تحقق برنامه‌های الکترونیکی و نوری با قابلیت‌های مکانیکی پیشرفته مانند الکترودهای شفاف انعطاف‌پذیر یا دستگاه‌های حسگر لمسی با مساحت بزرگ صورت گرفته است [۴ و ۵]. مولکول‌های زیستی از خود خواص الکتریکی و نوری نشان می‌دهند [۶]. در این مطالعه دی-اکسی‌ریبونوکلئیک‌اسید<sup>۳</sup> (دی‌ان‌ای) به‌عنوان یک مولکول زیستی با قابلیت سازگاری با سیستم‌های بیولوژیک و به‌عنوان گزینه‌ای مناسب برای مطالعه پدیده اپتوالکترونیک در سویچ‌های نوری مورد استفاده قرار می‌گیرد. DNA دارای خواص مواد منحصر به فردی است که دانشمندان مواد، نانو تکنولوژیست‌ها و مهندسان را جذب خود کرده است [۷]. مولکول DNA از یک مارپیچ دو رشته‌ای تشکیل شده است که هر رشته شامل یک مجموعه پلیمری از نوکلئوتیدهاست و هر نوکلئوتید از سه قسمت قند، بازهای آلی و گروه فسفات تشکیل شده است [۸]. در این پژوهش لیزر مادون قرمز به‌عنوان یک منبع نوری نقطه‌ای، جهت تابش نور روی DNA مورد استفاده قرار می‌گیرد. خواص اپتیکی DNA در سال‌های اخیر توجه وسیعی را به خود معطوف کرده است و تبدیل به یک گرایش در فوتوبیولوژی شده است [۹]. دستگاه‌های مولکولی با قابلیت پاسخ‌دهی فتوالکتریکی می‌توانند با اعمال محرک‌های خارجی مانند نور و حرارت در زمینه سویچ‌های نوری و سنسورهای زیستی مورد استفاده قرار گیرند [۱۰]. با اعمال یک ولتاژ خارجی، سیستم می‌تواند بین حالات روشن و خاموش سویچ کند. ضروری است که بر مبنای یک مدل ریاضی نسبت به مطالعه خواص اپتیکی اقدام شود. تاکنون مدل‌های متفاوتی برای مدل‌سازی معرفی شده است که در این مطالعه از ترکیب مدل پیارد-بیشاپ-داکسیوس (PBD)<sup>۴</sup> [۱۱] به

انضمام مدل نردبانی<sup>۵</sup> CL [۲۱] برای مطالعه سیستم استفاده شده است. در این پژوهش به دلیل غیرخطی بودن سیستم از رهیافت سیستم‌های دینامیکی غیرخطی برای تحلیل سیستم استفاده شده است [۱۳]. در این راستا معادلات تحول سیستم از هامیلتونی آن استخراج می‌شوند. در این مقاله محدوده دامنه نوری، فرکانس نوری و همچنین دمای مناسب برای رانش مناسب جریان الکتریکی بررسی شده است و همچنین با رسم نمودار جریان-ولتاژ، شاهد شکل‌گیری محدوده‌هایی شبه‌همیک و محدوده‌هایی با مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR) هستیم. پدیده NDR به حالتی گفته می‌شود که در آن با افزایش ولتاژ، شاهد کاهش جریان باشیم. این پدیده قبلاً در مطالعه رفتار سویچ مولکولی مشاهده شده است [۱۴]. در این مقاله از توالی ژنوم ویروس دلتای هپاتیت ATGAGCCAAGTTCGAACAAGGATTC GCGGGGAGGATAGATCAGCGCCCGAGAGG (GGTGA) با تعداد ۶۰ جفت باز استفاده شده است [۱۵].

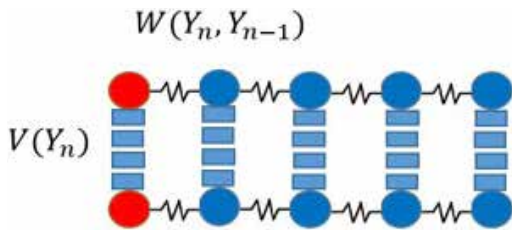
## روش بررسی

در سال‌های اخیر، برای مطالعه ساختار DNA و بررسی خواص الکتریکی آن، مدل‌های متفاوتی ارائه شده است. در سال ۱۹۹۳ پیارد، بیشاپ و داکسیوس مدل یک‌بعدی PB [۱۱] مربوط به دینامیک غیرخطی ذوب DNA را با جمله غیرخطی اندرکنش بازها در یک رشته تصحیح کردند و مدل PBD را ارائه نمودند. در این کار، مدل PBD همراه با مدل CL استفاده شده است [۱۲]. تصویر شماتیکی از مدل که برای مطالعه سیستم استفاده شده است در شکل ۱-الف نشان داده شده



شکل ۱: الف: تصویری از سیستم مورد مطالعه: مولکول DNA متصل به الکترودهای چپ و راست و غوطه‌ور در حمام گرمایی

1. Laser: Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation
2. Laser Surgery
3. Deoxyribonucleic acid
4. Peyrard-Bishop-Daoust



شکل ۲: زنجیره مولکول DNA متصل به الکترودها

عبارات  $H_{lead}$  و  $H_{lead-DNA}$  نیز هامیلتونی مربوط به الکترودها و اندرکنش آن‌ها با زنجیره DNA هستند که به صورت زیر بیان می‌شوند [۱۶]:

(۷)

$$H_{Lead} = \sum_{j=1,2} \sum_k (\epsilon_{L,j,k} + \frac{eV_b}{2}) a_{L,j,k}^+ a_{L,j,k} + \sum_{j=1,2} \sum_k (\epsilon_{R,j,k} - \frac{eV_b}{2}) a_{R,j,k}^+ a_{R,j,k}$$

(۸)

$$H_{lead-DNA} = \sum_{j=1,2} \sum_k (t_L a_{L,j,k}^+ c_{i,j} + t_R a_{R,j,k}^+ c_{j,N} + H.C)$$

که  $a_{\beta,j,k}^+$  با  $\beta = L, R$  عملگر خلق (فنا) الکترون در الکترود  $\beta$  است،  $\epsilon_{\beta,j,k}$  انرژی روی سایت الکترودها،  $V_b$  ولتاژ بایاس و  $t_{\beta}$  عناصر ماتریس تونل‌زنی از سایت  $k$  ام الکترود  $\beta$  به زنجیره DNA می‌باشد. در مطالعه کنونی، بیشتر جملات هامیلتونی غیرخطی هستند و حساسیت بالایی به شرایط اولیه دارند. از طرفی تحلیل سری زمانی حاصل از معادلات تحول DNA نشان می‌دهد که تحول فضایی این مولکول همانند تحول سیستم‌های آشوبناک است. معادلات حاکم بر قسمت الکترونی با استفاده از رابطه هایزنبرگ که به صورت زیر تعریف می‌شود، استخراج می‌شوند [۱۲]:

$$\dot{a}_n = \frac{-i}{\hbar} [a_n, H] \quad (۹)$$

$$\dot{c}_n = \frac{-i}{\hbar} [c_n, H] \quad (۱۰)$$

از طرفی، معادلات تحول کلاسیکی سیستم مربوط به جفت بازها را می‌توان از معادلات هامیلتونی استخراج کرد:

$$\ddot{y}_n = \frac{2a_e D_e \exp(-a_e y_n) (\exp(-a_e y_n) - 1) + \frac{k b \rho}{2m} \exp(-b(y_n + y_{n-1}))}{m} \quad (۱۱)$$

$$\begin{aligned} & (y_n - y_{n-1})^2 + \exp(-b(y_{n+1} + y_n))(y_n - y_n)^2 - \frac{k}{m} [1 + \rho \exp(-b(y_n + y_{n-1}))] (y_n - y_{n-1}) - \\ & (1 + \rho \exp(-b(y_{n+1} + y_n))(y_n - y_n)) - \frac{2p t_{\perp} \exp(-p y_n)}{m} \left( \langle c_{1,i}^{\dagger} c_{2,i} \rangle + \frac{V_{\perp}}{m} \chi \exp(-\chi y_i) \left( \langle n_{1,i} n_{2,i} \rangle - \frac{\langle c_{1,i}^{\dagger} c_{2,i} \rangle^2}{2} \right) \right) \end{aligned} \quad (۱۲)$$

$$i\hbar \dot{c}_{i,j} = (2\epsilon_{i,j}) c_{i,j} - V_{j,j-1} c_{j-1} - V_{j,j+1} c_{j+1} + V_{i,j} c_{j,i}^{\dagger} - t_{i,j} \exp(-p y_i) (c_{2,i} + c_{1,i}) + V_{\perp} \exp(-\chi y_i) [c_{1,i} c_{2,i}^{\dagger} + c_{1,i}^{\dagger} c_{2,i}] c_{2,i} + \frac{U}{4} (n_{j,i} + H.C) c_{j,i} + \sum (\delta_{i,i} t_{L,i,k} + \delta_{N,i} t_{R,i,k})$$

$$i\hbar \dot{a}_{L,k} = \left( \epsilon_{L,k} + \frac{eV_b}{2} \right) a_{L,k} + t_L a_i \quad (۱۳)$$

$$i\hbar \dot{a}_{R,k} = \left( \epsilon_{R,k} - \frac{eV_b}{2} \right) a_{R,k} + t_R a_N \quad (۱۴)$$

است. در نتیجه هامیلتونی کلی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = H_{PBD} + H_{\epsilon} + H_E + H_{lead} + H_{lead-DNA} \quad (۱)$$

در رابطه ۱،  $H_{DNA}$  هامیلتونی مربوط به مدل PBD،  $H_{CL}$  هامیلتونی مدل نردبانی،  $H_E$  هامیلتونی میدان الکتریکی،  $H_{lead}$  و  $H_{lead-DNA}$  به ترتیب هامیلتونی مربوط به الکترودها و اندرکنش بین مولکول DNA با الکترودها می‌باشد. هامیلتونی  $H_{PBD}$  شامل جملات زیر است (تصویر ساده‌ای از مدل PBD در شکل ۱-ب نشان داده شده است) [۱۱]:

$$H_{DNA} = \sum_n \frac{1}{2} m y_n^2 + V(y_n) + W(y_n + y_{n+1}) \quad (۲)$$

که  $V(y_n) = D_n (e^{a_n y_n} - 1)$  پتانسیل مورس می‌باشد که به فرم  $V(y_n) = D_n (e^{a_n y_n} - 1)$  است. انرژی توده‌ای بین جفت بازهای مجاور هم به صورت زیر معرفی می‌شود [۱۱]:

$$W(y_n, y_{n+1}) = \frac{K}{2} (1 + \rho \exp(-\alpha(y_n + y_{n+1}))) (y_{n+1} - y_n)^2 \quad (۳)$$

جمله دوم در رابطه ۱، ( $H_{CL}$ ) مربوط به هامیلتونی مدل نردبانی می‌باشد که به صورت زیر بیان می‌شود [۱۲]:

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

در این رابطه  $j$  و  $i$  به ترتیب، تعداد رشته‌ها و تعداد سایت‌ها در هر رشته می‌باشند.  $(c_{j,i}^{\dagger} c_{j,i})$  عملگر خلق (فنا) یک الکترون در سایت  $(j, i)$ ،  $t_{\parallel}$  انرژی روی سایت الکترون،  $t_{\perp}$  انرژی پرش بین جفت بازهای مجاور،  $t_{\perp}$  انرژی پرش بین جفت بازهای داخلی،  $p$  ثابت جفت‌شدگی،  $y_i$  کشش باند  $i$  ام،  $V_{\perp}$  برهمکنش کولمبی بین بازهای مجاور، برهمکنش کولمبی بین بازهای مکمل،  $\chi$  معکوس طول دبای می‌باشد.

جمله سوم در رابطه ۱، ( $H_E$ ) هامیلتونی میدان الکتریکی نور تابشی به صورت زیر می‌باشد [۱۱]:

$$H_E = -t_{\parallel} \sum_{j=1,2} \sum_i \left[ \exp\left(\frac{i e r_0}{\hbar c} A(t)\right) c_{j,i}^{\dagger} c_{j,i+1} + H.C. \right] \quad (۵)$$

در معادله فوق،  $e$ ،  $r_0$ ،  $c$  به ترتیب، فاصله ثابت بین بازهای مجاور در یک رشته، بار الکتریکی و سرعت نور می‌باشند همچنین  $A(t)$  بردار موج مربوط به میدان الکتریکی است که به صورت زیر بیان می‌شود [۱۱]:

$$A(t) = A_0 \cos(\omega t) \exp\left[-\frac{(t - t_c)^2}{2\tau^2}\right] \quad (۶)$$

که در آن  $\omega$ ،  $\tau$ ،  $A_0$  فرکانس، نصف پهنای پالس و دامنه موج می‌باشد. همان‌طور که گفته شد، DNA مطابق شکل ۲ بین دو الکترود ثابت شده است:

## یافته‌ها

جریان الکتریکی را می‌توان از معادلات حرکت با استفاده از معادله پیوستگی بار-جریان استخراج کرد [۷]. به طوری که  $n_i = c_i' c_i$  و  $i = \frac{-ie}{h} \{ \sum_n V_{n,n+1} (c_n^+ c_{n-1} - c_{n-1}^+ c_n) + V_{n,n+1} (c_n^+ c_{n+1} - c_{n+1}^+ c_n) + \sum_{j,k} t_{L,j,k} [a_{j,k}^+ c_{j,l} - c_{j,l}^+ a_{l,j,k}] + \sum_{j,k} t_{R,j,k} [a_{j,k}^+ c_{j,N} - c_{j,N}^+ a_{R,j,k}] - t_j \sum_{j,n} [c_{j,n+1}^+ c_{j,n} - c_{j,n}^+ c_{j,n+1}] + c_{j,n-1}^+ c_{j,n} - c_{j,n}^+ c_{j,n-1} \}$

تغییرات دامنه نور نیز می‌تواند عامل تأثیرگذاری در انتقال بار در زنجیره DNA باشد. با توجه به شکل ۵ بیشترین مقدار جریان تقریباً در  $A_0 = 0.3 \left( \frac{hc}{eV_0} \right)$  از سیستم عبور می‌کند، یعنی مناسب‌ترین محدوده دامنه نور برای عبور بیشترین جریان از سیستم در این محدوده می‌باشد. پس با تنظیم فرکانس و دامنه نور فرودی، سیستم می‌تواند همانند یک سوئیچ عمل کند.

## اثر میدان الکتریکی

انتقال جریان در یک سیستم مولکولی زیستی از طریق تغییر ولتاژ می‌تواند کنترل شود. در مطالعه اخیر تأثیر تغییرات ولتاژ را روی رسانایی الکتریکی نور در غالب منحنی مشخصه جریان-ولتاژ بررسی می‌کنیم. بدین منظور توالی DNA را به الکترودهایی با ولتاژ قابل کنترل متصل می‌کنیم. ویژگی‌های نمودار I-V سیستم‌های مولکولی بیانگر پتانسیل بالای این سیستم‌ها برای کاربردهای غیرخطی، مقاومت دیفرانسیلی منفی و سوئیچ جریان الکترواستاتیک و الکترومکانیک است [۱۷ و ۱۸]. بنابراین در شکل ۶ ناحیه شبه‌اهمی و مقاومت دیفرانسیل منفی (NDR) مشخص شده است. همان‌طور که در شکل مشخص شده است، برای یک فرکانس ثابت در ابتدا شاهد رفتار شبه‌اهمی در سیستم هستیم. با افزایش

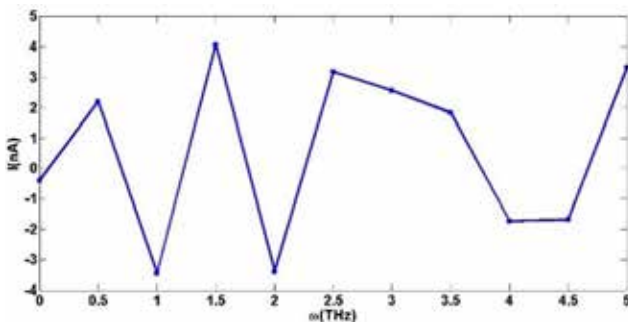
در این کار، تمامی پارامترهای سیستم مطابق مرجع [۱۲] انتخاب شده‌اند.

## سری زمانی

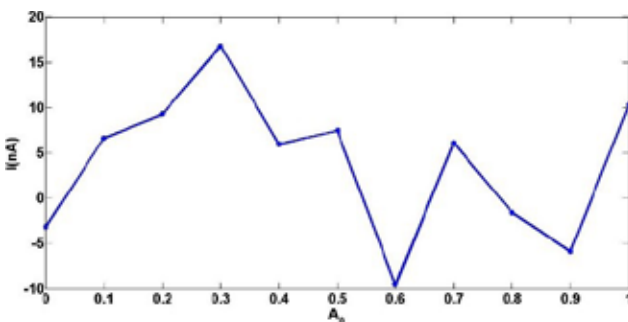
سری زمانی جریان عبوری از سیستم می‌تواند به‌عنوان یک مشخصه رفتار خطی یا غیرخطی سیستم را مشخص نماید. همان‌طور که از شکل ۳ مشاهده می‌شود، جریان نسبت به زمان به‌صورت تناوبی تقریباً منظم تغییر می‌کند. سری زمانی برای زمان کوتاه حدود ۱۰۰۰ پیکوثانیه اندازه‌گیری شده است. با ادامه اندازه‌گیری می‌توان شاهد رفتار کاملاً غیرخطی و حتی نامنظم در جریان عبوری از سیستم بود.

## اثر فرکانس و دامنه نور فرودی

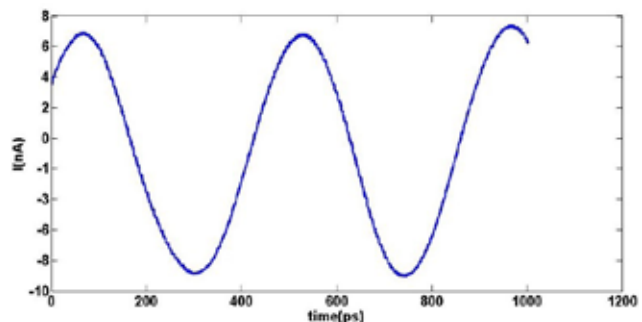
فرکانس و دامنه نور اعمال شده از عوامل تأثیرگذار روی جریان الکتریکی عبوری از سیستم هستند که بر روی فرآیند سوئیچ تأثیر می‌گذارند. برای این کار ما فرکانس و دامنه نور را تغییر می‌دهیم و جریان الکتریکی عبوری از DNA را مطالعه می‌کنیم. بدین منظور، دامنه متغیر نور فرودی در محدوده  $(1-0)$  در واحد  $\left( \frac{hc}{eV_0} \right)$  و محدوده فرکانس نور فرودی در بازه  $(5-0)$  THz می‌باشد. شکل ۴ تغییرات جریان را با توجه به فرکانس نور اعمال شده نشان می‌دهد. این شکل نشان می‌دهد که برای یک فرکانس مشخص جریان به بیشترین مقدار خود می‌رسد تا جایی که در فرکانس  $\omega = 1.5$  THz جریانی نزدیک به  $I = 4$  nA از زنجیره DNA عبور می‌کند. همچنین در فرکانس‌های  $\omega = 1$  THz و



شکل ۴: جریان بر حسب فرکانس



شکل ۵: جریان بر حسب دامنه موج نور فرودی

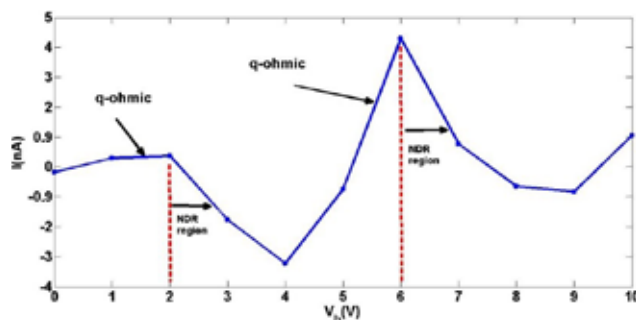


شکل ۶: سری زمانی جریان عبوری از توالی ویروس

دمای اتاق حالت سویچ سیستم روشن است و در محدوده ۳۱۵ تا ۳۳۰ درجه کلوین، سیستم در حالت خاموش سویچ می‌باشد. سپس در دمای K ۳۳۰ مجدداً سویچ روشن می‌شود و در نهایت در K ۳۴۰ خاموش می‌شود.

### بحث و نتیجه‌گیری

در این کار ما سعی کرده‌ایم انتقال جریان الکتریکی و تأثیر نور تابشی را در طراحی یک سویچ نوری بر مبنای زنجیره DNA بررسی کنیم. فرکانس و دامنه نور از فاکتورهای مهم در بررسی پاسخ الکتریکی DNA به نور تابشی می‌باشند. به همین منظور فرکانس و همچنین دامنه نور فرودی را تغییر داده‌ایم تا محدوده‌ای از این پارامترها را که در آن حداکثر جریان الکتریکی از DNA عبور می‌کند، به دست آوریم. در مطالعه حاضر، اثر نور فرودی از طریق تغییر پارامتر پرش الکترون بین سایت‌ها اعمال شده و از طریق جریان الکتریکی عبوری آشکارسازی شده است. مطالعه مشابه در یک مولکول نشان می‌دهد که با تابش نور فرابنفش با طول موج ۳۰ نانومتر، حالت بسته مولکول تبدیل به حالت باز می‌شود و جریان عبوری از سیستم به ۶۰ میکروآمپر در ولتاژ ۲ ولت می‌رسد [۲۱]. اینجا سری زمانی جریان عبوری از DNA می‌تواند رفتار این سیستم با گذر زمان را نشان دهد که با افزایش زمان اندازه‌گیری شاهد رفتار غیرخطی سیستم خواهیم بود. دمای محیط از عوامل تأثیرگذار برای تنظیم و کنترل انتقال بار DNA می‌باشد که نشان می‌دهد با افزایش دما در حالت کلی شاهد سیر نزولی جریان عبوری هستیم تا جایی که در دمای ذوب (K ۳۴۰) سویچ خاموش می‌شود. از سوی دیگر، نمودار مشخصه I-V مناطق شبه‌اهمی و NDR را نشان می‌دهد که عرض این نواحی در محدوده‌های ولتاژ متفاوت تغییر می‌کند. بروز این نواحی قبلاً نیز در سویچ‌های اپتیکی مولکولی مشاهده شده است [۲۲]. همچنین با کنترل عوامل محیطی می‌توان شرایطی را ایجاد کرد که شاهد عمل سویچ توسط DNA باشیم. برای ادامه کار پیشنهاد می‌شود که اثر اسپین الکترون نیز در نظر گرفته شود تا بتوان یک سیستم سویچ نوری بر مبنای اسپین را طراحی نمود.



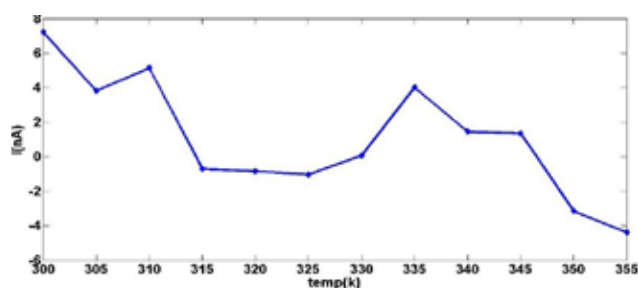
شکل ۶: نمودار جریان بر حسب ولتاژ برای ویروس

پتانسیل اعمالی شیب نمودار I-V به منفی تغییر می‌کند. به عبارت دیگر شاهد بروز پدیده NDR هستیم. مجدداً با افزایش ولتاژ شاهد تکرار متناوب این نواحی هستیم. شایان ذکر است که عرض نواحی شبه‌اهمی و NDR با افزایش ولتاژ تغییر می‌کند. پس به عبارتی می‌توان بیان کرد که با تغییرات ولتاژ، جریان در سیستم کنترل می‌شود و سیستم در محدوده‌هایی به عنوان سیم (محدوده شبه‌اهمی) و در محدوده‌هایی به عنوان سویچ (محدوده NDR) عمل می‌کند.

### اثر دما

دمای محیط از عوامل تأثیرگذار در مطالعه خواص انتقال بار در DNA می‌باشد. دمای محیط را به وسیله ترموستات می‌توان تغییر داد. به عبارتی یک ترموستات دینامیک مولکولی، حمام حرارتی را به کل سیستم یا به بخشی از آن وصل می‌کند [۱۹]. بدین منظور برای مدل‌سازی اثر دما از ترموستات نوز-هوور [۲۰] به عنوان منبع حرارت استفاده شده است. معادله تحول ترموستات به صورت  $\dot{y} = \frac{1}{M} \sum m_i y_i^2 - NK_B T_0$  تعریف می‌شود که در این رابطه M ثابت ترموستات نوز-هوور است که مقدار آن  $M=1000$ ،  $T_0$  دمای ترموستات و  $K_B$  ثابت بولتزمن می‌باشد. بنابراین ما می‌توانیم طیفی از دما را به دست آوریم که در آن جریان حداکثر از طریق DNA عبور می‌کند (شکل ۷).

همان‌گونه که مشخص است، در دماهای K ۳۱۰ و K ۳۵۵ بیشترین جریان عبوری از سیستم را شاهد هستیم، بنابراین این دماها را به عنوان دمای ایدئال برای سیستم در نظر می‌گیریم و همچنین می‌توان بیان کرد در



شکل ۷: اثر جریان بر حسب دما برای ویروس

### 6. Nosé-Hoover



**References:**

1. Braun D, Libchaber A. Trapping of DNA by Thermophoretic Depletion and Convection. *Physical Review Letters*, 2002; 89(18): 188103.
2. Teixeira, G R, da Silva Marciano, R da Silva Sergio, L P Polignano, G A C Guimaraes, O R Geller, M da Fonseca, A D S. Infrared Laser Effects at Fluences Used for Treatment of Dentin Hypersensitivity on DNA Repair in Escherichia Coli and Plasmids. *Optics & Laser Technology*, 2014; 64: 46-52.
3. Barnes FS. Applications of Lasers to Biology and Medicine. *Proceedings of the IEEE*, 1975; 63(9): 1269-78.
4. Bae S, Kim H, Lee Y, Xu X, Park J S, Zheng Y, Kim Y J. Roll-to-Roll Production of 30-inch Graphene Films for Transparent Electrodes. *Nature Nanotechnology*, 2010; 5(8): 574.
5. Chakraborty S, Marshall OP, Folland TG, Kim YJ, Grigorenko AN, Novoselov KS. Gain Modulation by Graphene Plasmons in Aperiodic Lattice Lasers. *Science*, 2016; 351(6270): 246-8.
6. Keiser G. *Biophotonics: Concepts to Applications*. Boston: Springer, 2016.
7. Palmer MC, Takahashi M, Westman HF. WKB Analysis of Relativistic Stern–Gerlach Measurements. *Annals of Physics*, 2013; 336: 505-16.
8. Mashaghi A, Katan, A. A physicist's View of DNA. *arXiv preprint arXiv*, 2013; 1311: 2545.
9. Watson JD, Crick FH. Letters to Nature: Molecular Structure of Nucleic Acid. *Nature*, 1953; 171(4356): 737-8.
10. Shi Y, Zhang C, Zhang H, Bechtel J, Dalton L, Robinson B, Steier W. Low (Sub-1-Volt) Halfwave Voltage Polymeric Electro-Optic Modulators Achieved by Controlling Chromophore Shape. *Science*, 2000; 288(5463): 119-22.
11. Dauxois T, Peyrard M, Bishop AR. Dynamics and Thermodynamics of a Nonlinear Model for DNA Denaturation. *Physical Review E*. 1992; 47(1): 684.
12. Zhang LL, Xie SJ, Kang DW. Role of Photoresponse of  $\pi$  Electrons in Light-Driven DNA Dissociations. *Physical Review E*, 2017; 96(2): 022414.
13. Marquetand P, Nogueira J, Mai S, Plasser F, González L. Challenges in Simulating Light-Induced Processes in DNA. *Molecules*, 2016; 22(1): 49.
14. Guisinger, NP, Greene ME, Basu R, Baluch AS, Hersam MC. Room Temperature Negative Differential Resistance through Individual Organic Molecules on Silicon Surfaces. *Nano Letters*, 2004; 4(1): 55-9.
15. Maizels MR, Tetteh KK A, Loukas A. *Toxocara Canis: Genes Expressed by the Arrested Infective Larval Stage of a Parasitic Nematode*. *International Journal for Parasitology*, 2000; 30 (4): 495-508.
16. Behnia S, Fathizadeh S, Akhshani A. DNA Spintronics: Charge and Spin Dynamics in DNA Wires. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2016; 120 (5): 2973-83.
17. Rueckes T, Kim K, Joselevich E, Tseng GY, Cheung L, Lieber CM. Carbon Nanotube-Based Nonvolatile Random Access Memory for Molecular Computing. *Science*, 2000; 28 (5476): 994.
18. Collier CP, Wong EW, Belohradsk M, Raymo FM, Stoddart JF, Kuekes PJ, Williams RS, Heath JRA [2] Catenane-Based Solid State Electronically Reconfigurable Switch. *Science*,

2000; 289(5482): 1172.

19. Evans DJ, Morriss GP. Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids, Academic Press, London, 1990.

20. Behnia S, Fathizadeh S, Akhshani A. DNA in a Dissipative Environment: A Charge Transfer Approach. Journal of the Physical Society of Japan, 2015; 84(8): 084002.

21. Vollhardt D. Characteristic Crossing Points in Specific Heat Curves of Correlated Systems. Physical Review Letters, 1997; 78(7): 1307.

22. Chen F, He J, Nuckolls C, Roberts T, Klare JE, Lindsay S. Controlled growth of Si nanowire arrays for device integration, Nano Letters, 2005; 5(3): 457-60.