ترابرد گرما از طریق مولکول DNA

اسلامی مشکنانی ، علی ؛ کتابی، سید احمد

دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان

چکیده

در این مقاله، با استفاده از روش تابع گرین غیرتعادلی در چارچوب مدل نردبانی برای مولکول DNA به مطالعه‌ی عددی برخی از خواص رسانندگی گرمایی این مولکول پرداخته و تأثیر دو پارامتر طول مولکول و قدرت برهمکنش پیوندگاه فلز- مولکول بر چگالی حالت‌های فونونی و رسانندگی گرمایی از طریق مولکول DNA بررسی می‌شود. محاسبات در حضور مدهای طولی و عرضی انجام شده است.

Thermal Transport in DNA

Eslami Moshkeani, Ali; Ketabi, Seyed Ahmad

School of Physics, Damghan University, Damghan, Iran,

In this paper, using non- equilibrium Greens' function technique and in the framework of ladder model for DNA molecule, some thermal properties of the molecule are numerically calculated. The effects of molecule length and the coupling strength of metal-molecule junction on the phonon density of states and thermal transport through DNA molecule is investigated. We performed our calculations for longitudinal and transverse modes.

PACS No. 72.00

مقدمه

پیشرفت‌های چشمگیر ربع آخر قرن گذشته درفناوری، بهره‌وری صنعتی و بویژه توسعه قابل توجه درعلوم ارتباطات، صنایع الکترونیک و فناوری نانومتری که مبتنی برچگونگی استفاده از خواص الکترونی مواد رساناست حاکی از نقش کلیدی علم مواد و فیزیک ماده چگال در توسعه صنعتی است. پیشرفت‌های فناوری که حاصل وتاثیر آنها بر جوامع، بطور قابل ملاحضه‌ای زندگی ما را تغییر داده است[۱].

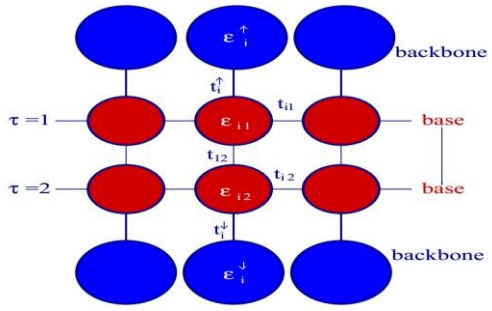
درپی فرایند کوچک‌سازی اجزاء و مدارات الکترونیکی، علاوه بر سرعت پردازش، توان مصرفی نیز کاهش می‌یابد. به منظور دسترسی به ابعاد کوچک‌تر، باید فناوری جدید برای ساخت مواد توسعه یابد یعنی باید از مولکولهایی نظیر مولکول‌های آلی از جمله مولکول DNA به اندازه ۰/۱ تا چندین نانومتر استفاده شود[۲].

از موضوعاتی که امروزه توجه بسیاری را بخود جلب نموده چگونگی ترابرد گرما از طریق مولکول DNA است. در این زمینه کارهای تجربی و محاسباتی کمی منتشر شده است [۳]. در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین غیر تعادلی خواص ترابرد گرمایی مولکول DNA را در ساختار مدل فلز- مولکول- فلز بصورت عددی بررسی می کنیم. بطور کلی مطالعه ترابرد گرما در نانوابزارها نه تنها کمک به فهم قوانین فیزیکی حاکم بر پدیده ترابرد می‌نماید بلکه راهگشای فناوری‌های آینده مبتنی بر ترابرد گرما است. تولید گرما تاثیر تخریبی بر بازده و پایداری سیستم دارد. کاهش این اتلاف و بازیابی آن بعنوان منبع جدید انرژی آرزوی دیرینه بشر بوده است. بصورت نظری و آزمایشگاهی ابزارهای کنترل گرما (دیود و ترانزیستور) مشابه ابزارهای الکترونیک پیشنهاد شده است [۱۳-٤]. با توجه به نیاز اساسی به طراحی نانو بیومدارها، مطالعه خواص ترابرد گرمایی بیو مدارهایی همچون مولکولDNA اهمیت اساسی دارد.

DNA یک مولکول پلیمری متشکل از زیرواحدهای نوکلئوتیدی می‌باشد. هر نوکلئوتید ترکیبی از سه زیر واحد قند ۵کربنه، بازهای آلی و گروه فسفات می‌باشد. بازهای آلی به چهار نوع شامل آدنین، گوانین، تایمین و سایتوزین تقسیم‌بندی می‌شوند. اتصال

نوکلئوتیدها بهم تشکیل یک رشته نوکلئوتیدی می‌دهد. دو رشته نوکلئوتیدی در مقابل هم، از طریق پیوندهای هیدروژنی بین بازهای آلی به هم پیوند می‌خورند و این تشکیل یک زنجیره DNA را می‌دهد.

در این مقاله، از مدل دوبعدی نردبانی[۱٤] برای توصیف مولکول DNA و روش تابع گرین غیرتعادلی (NEGF) برای مطالعه عددی خواص رسانندگی گرمایی از طریق مولکول استفاده شده است.



شکل۱ :طرح واره ای از مدل نردبانی DNA

روش محاسبه

ساختار مولکول آلی DNA را به صورت یک زنجیره شبه یک بعدی با دو نوکلوئید در هر پایه (مدل نردبانی) در نظر می‌گیریم که به دو الکترود نیم‌بی‌نهایت فلزی متصل است. با محاسبه تابع گرین سطحی، اثرات الکترودها را به صورت خودانرژی‌هایی در تابع گرین مولکول DNA وارد می‌کنیم.

با در نظر گرفتن یک پیوندگاه مدل بصورت فلز- DNA – فلز که در آن الکترودهای فلزی نقش منابع گرمایی در دمای معین را دارند خواص ترابرد گرمایی سامانه بررسی می‌شود. با اعمال یک اختلاف دمای معین ΔT بین منابع گرمایی، از روش تابع گرین غیرتعادلی(NEGF) برای مطالعه چگونگی ترابرد گرمای بالستیک استفاده می‌شود. با در نظر گرفتن منابع گرمایی بصورت زنجیره های یک بعدی نیمه نامحدود هامیلتونی سامانه بصورت زیر داده می‌شود:

$$H=\sum_{\alpha=L\cdot C\cdot R}H_{\alpha}+(u^{L})^{T}V^{LC}u^{C}+(u^{C})^{T}V^{CR}u^{R} \qquad (۱)$$

که در آن،

$$H_{\alpha}=\frac{1}{2}(\dot{u}^{\alpha})^{T}\dot{u}^{\alpha}+\frac{1}{2}(u^{\alpha})^{T}k^{\alpha}u^{\alpha} \qquad (۲)$$

عبارت اول در سمت راست معادله (۲) می‌تواند به‌عنوان انرژی جنبشی کل در منبع گرمایی α درنظر گرفته‌شود، K^{α} ماتریس ثابت‌های فنر در منبع α است. علاوه بر این، V^{LC} (V^{CR}) ماتریس جفت شدگی منبع گرمایی چپ (راست) به مولکول است. ماتریس دینامیکی سامانه را می توان بصورت زیر نوشت:

$$K=\begin{pmatrix}K^{L} & V^{LC} & 0\\ V^{CL} & K^{C} & V^{CR}\\ 0 & V^{RC} & K^{R}\end{pmatrix} \qquad (۳)$$

عناصر ماتریسی صفر بیانگر این است که منبع گرمایی سمت چپ و سمت راست مولکول DNA با یکدیگر برهم‌کنش ندارند. جریان گرمای بالستیک از طریق سامانه مدل توسط فرمول لانداور و بصورت زیر بیان می‌شود [۱۵]:

$$I=\int_{0}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\hbar\omega T[\omega](f_{L}-f_{R}) \qquad (٤)$$

که در آن $T(\omega)$ احتمال عبور فونون با فرکانس ω است. اگر اختلاف دمای ΔT منابع گرمایی چپ و راست کم باشد، رسانندگی گرمایی در دمای T توسط حد زیر تعریف می‌شود[۱٤]:

$$\sigma=\lim_{T_{L}.T_{R}\to T}\frac{1}{T_{L}-T_{R}}=\int_{0}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\hbar\omega T[\omega]\frac{\partial f}{\partial T} \qquad (۵)$$

علاوه بر این، تابع گسیل فونونی بصورت $T(\omega)=Tr[G^{r}\Gamma_{L}G^{a}\Gamma_{R}]$ داده می‌شود که $G^{r}=\left(G^{a}\right)^{+}$ تابع گرین تاخیری مولکول است و $\Gamma_{L(R)}$ نمایش برهم‌کنش بین منابع گرمایی و مولکول است. تابع گرین تاخیری مولکول را می‌توان از حل معادله $\left[(\omega+i\eta)^{2}I-K\right]G=I$ بدست آورد. با تقسیم بندی ماتریس به ناحیه‌ی چپ، وسط و راست، معادله به فرم صریح زیر در می‌آید:

$$\begin{aligned}&\left[(\omega+i\eta)^{2}I-K^{L}\right]G^{LC}-V^{LC}G^{CC}=0\\ &-V^{CL}G^{LC}+\left[(\omega+i\eta)^{2}I-K^{C}\right]G^{CC}-V^{CR}G^{RC}=I\\ &-V^{RC}G^{CC}+\left[(\omega+i\eta)^{2}I-K^{R}\right]G^{RC}=0\end{aligned} \qquad (۷)$$

هدف نهایی محاسبه $G^{CC}=G^{r}$ است. پس از ساده سازی معادلات رابطه نهایی زیر بدست می‌اید:

$$G^{r}=G^{CC}=\left[(\omega+i\eta)^{2}I-\sum_{L}^{r}-\sum_{R}^{r}-K^{C}\right]^{-1} \qquad (۸)$$

که در آن خود- انرژی تاخیری منابع گرمایی بصورت $\sum^{r}_{\alpha C} = V^{C\alpha} g^{r}_{\alpha} V^{\alpha C}$ است. به این ترتیب با محاسبه تابع خود- انرژی می‌توان توابع $\Gamma_{L(R)}$ برای محاسبه گسیل فونونی بدست آورد:

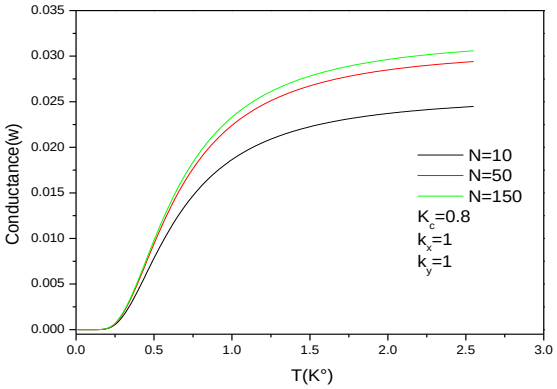
$$\Gamma_{\alpha} = i\left(\sum^{r}_{\alpha} - \left(\sum^{r}_{\alpha}\right)^{+}\right) = -2ImV^{C\alpha} g^{r}_{\alpha} V^{\alpha C} \qquad (۹)$$

$$\sum^{r}_{R} = V^{cr} g^{R}_{00} (V^{cr})^{T} \qquad (۱۰)$$

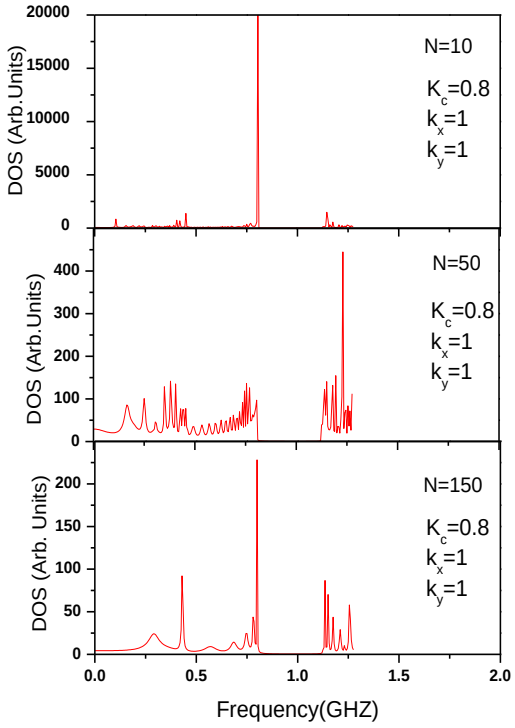
برای محاسبه g^{α}_{00}، از روش لوپزسانچو [۱٦] استفاده شده است. این ارتباط از طریق نوشتن کد برنامه نویسی در محیط MATLAB و رسم نمودار با نرم افزارهای گرافیکی انجام می‌شود.

اثر طول مولکول DNA بر خواص گرمایی سامانه

در این بخش اثر طول مولکول را بر رسانندگی گرمایی و چگالی حالت‌های فونونی مولکول DNA برای تعداد ۱۰، ۵۰ و ۱۵۰ زوج پایه (معادل طول مولکول) بررسی می‌شود. در این محاسبات قدرت سفتی پیوندگاه فلز- مولکول K_c = ۰٫۸ در نظر گرفته شده است. شکل۲ نشان می‌دهد که با افزایش طول مولکول رسانندگی گرمایی افزایش می‌یابد.



شکل۲: نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب دما برای طول‌های مولکول شامل۱۰، ۵۰ و ۱۵۰ زوج پایه

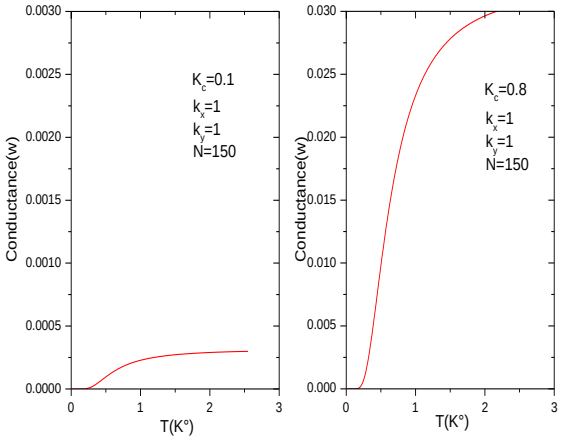


شکل۳: نمودار چگالی حالت‌های فونونی برای ۱۰، ۵۰، ۱۵۰ زوج پایه

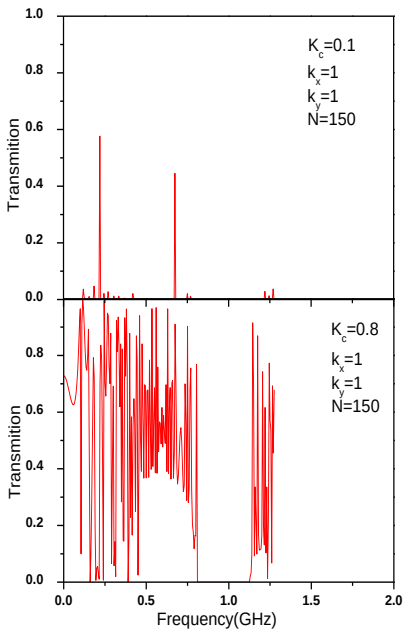
اثر قدرت برهمکنش پیوندگاه فلز- مولکول(Kc)

با افزایش قدرت برهمکنش پیوندگاه فلز- مولکول رسانندگی گرمایی به‌طور قابل ملاحضه‌ای افزایش می‌یابد. زیرا احتمال گسیل فونون از پیوندگاه فلز- مولکول بیشتر شده است و رسانندگی گرمایی افزایش می‌یابد. این نتیجه برای مولکول DNA با مدل نردبانی و تعداد زوج پایه های(طول مولکول) ۱۵۰ برای K_c های ۰٫۱ و ۰٫۸ الکترون ولت نشان داده شده است.

چنانچه از شکل ٤ پیداست با افزایش K_c، رسانندگی گرمایی به میزان زیادی افزایش می‌یابد.



شکل٤: نمودار رسانندگی برحسب دما برای قدرت برهم‌کنش پیوندگاه فلز–مولکول Kc=0.1 ,0.8 الکترون ولت



شکل٥: نمودار گسیل فونونی برحسب فرکانس برای Kc=0.1, 0.8 و N=150

نتیجه گیری:

استفاده از خواص منحصر بفرد مولکول DNA در قطعات الکترونیک مولکولی آینده از جمله موضوعات پژوهشی مهم است. پژوهش‌های منتشر شده در دهه اخیر حاکی از آن است که رفتار و خواص نیم‌رسانندگی مولکول DNA چشم انداز جدیدی را در طراحی سیم‌های مولکولی گشوده است. بر این اساس مطالعه‌ی تجربی و نظری خواص رسانندگی مولکول دی.ان.ای مورد توجه خاص پژوهشگران این زمینه تحقیقاتی قرار گرفته است.

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین غیرتعادلی درچارچوب مدل نزدیکترین همسایه برای مولکول DNA به مطالعه‌ی عددی برخی از خواص رسانندگی گرمایی این مولکول پرداخته و تاثیر دو پارامتر طول مولکول و قدرت برهمکنش پیوندگاه فلز–مولکول بر چگالی حالت‌های فونونی و رسانندگی گرمایی از طریق مولکول DNA بررسی شد. نتایج ما نشان می‌دهد که: ۱– مولکول DNA خاصیت نیمرسانندگی دارد ۲– رسانندگی گرمایی با افزایش طول مولکول DNA افزایش می‌یابد. ۳– افزایش قدرت پیوندگاه الکترود–مولکول منجر به افزایش قابل ملاحضه‌ای در رسانندگی گرمایی می‌شود.

مرجع‌ها

[1] Moore، G. E.(1965). "Cramming more components onto intergrated circuits." Electronics Vol. 38، pp. 114

[2] Marcus، R. and Sutin، N.(1985). "Electron transfers in chemistry and Biology." Biochem Biophys Acta. Vol.811، pp.265

[3] A V Savin, M A Mazo, I P Kikot, L I Manevitch and A V Onufriev Phys. Rev. B 83, 245406 (2011)

[4] M. Terraneo, et al. “Controlling the energy flow in nonlinear lattices: a model for a thermal rectifier.” Physical review letters 88.9 (2002): 094302.

[5] L. Baowen, et al. “Thermal diode: rectification of heat flux.” Physical review letters 93.18 (2004): 184301.

[6] L. Baowen, et al. “Negative differential thermal resistance and thermal transistor.” Applied Physics Letters 88.14 (2006): 143501.

[7] B. Hu, et al. “Asymmetric heat conduction in nonlinear lattices.” Physical review letters 97.12 (2006): 124302

[8] D. Segal and A. Nitzan. “Spin-boson thermal rectifier.” Physical review letters 94.3 (2005): 034301.

[9] C. Chang. “Solid-state thermal rectifier.” Science 314.5802 (2006): 1121.

[10] N. Yang, et al. “Carbon nanocone: a promising thermal rectifier.” Applied Physics Letters 93.24 (2008): 243111.

[11] H. Tian, et al. “A novel solid-state thermal rectifier based on reduced graphene oxide.” Scientific reports 2 (2012).

[12] D. Segal. “Heat flow in nonlinear molecular junctions: Master analysis.” Physical Review B 73.20 (2006): 205415.

[13] D. He, et al. “Origin of negative differential thermal resistance in a chain of two weakly coupled nonlinear lattices.” Physical Review B 80.10 (2009): 104302.

[14] D.Klotsa، R. A. Romer and M.S.Turners Biophysical Journal، 89، 2187(2005)

[15] Xu, Zaoli, "Thermal transport in DNA" (2015). *Graduate Theses and Dissertations.* Paper 14727

[16] M P Lopez Sancho, J M Lopez Sancho and J Rubio Instituto de Fisica de Materiales, CSIC,Serrano 144, Madrid 6, Spain