بررسی خواص رسانندگی گرمایی مولکول DNA در حضور مدهای طولی و عرضی

اسلامی مشکنانی ، علی ؛ کتابی، سید احمد

دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان

چکیده

تاکنون بیشتر مطالعات صورت گرفته بر روی حالت‌های فونونی مولکول DNA در حضور مدهای طولی(یک بعدی) انجام گرفته است. در این مقاله، با استفاده از روش تابع گرین غیرتعادلی در چارچوب مدل نردبانی برای مولکول DNA علاوه بر مدهای طولی، مدهای طولی- عرضی (دوبعدی) را نیز درنظر گرفته‌ایم. نتایج ما نشان می‌دهد حضور مدهای عرضی حالت‌های فونونی را تقویت نموده و منجر به افزایش رسانندگی گرمایی در مولکول DNA می‌شود.

Thermal conductance properties of DNA molecule in the presence of longitudinal and transverse modes

Eslami Moshkeani, Ali; Ketabi, Seyed Ahmad

School of Physics, Damghan University, Damghan, Iran,

Up to now, most of studies on the phonon states of DNA molecule have been in the presence of longitudinal modes in one-dimension. In this work, we considered the longitudinal- transverse modes in 2-dimension for investigating of thermal properties of DNA. Based on non-equilibrium Green's function technique, our results indicate that the presence of transverse modes give rise to reinforcement of the phonon states in DNA molecule and thus the thermal conductance of the molecule increased.

PACS No 63.20

مقدمه

در سه دهه‌ی اخیر پیشرفت فناوری الکترونیک و رایانه به توسعه هر چه سریع‌تر و قدرتمند، فرآیند کوچک‌سازی اجزاء و مدارات در قطعات الکترونیکی بستگی دارد. فناوری نانو می‌تواند چگونگی استفاده از قطعاتی که اندازه مشخصی تنها درحدود چندین نانومتر دارند را در برگیرد. این فناوری، فرصت کمینه سازی اندازه یک قطعه را می‌دهد و ماده، انرژی و زمان لازم برای انجام این کار کاهش می‌یابد[۱-۲].

کوچک سازی عناصر مدارها تاحد نانومتری بر پایه فناوری سیلیکون مشکلاتی از قبیل ظرفیت خازنی محل جفت شدن اجزاء، اتلاف گرمایی و آلاییدن یکنواخت سیلیکون در این ابعاد را به‌همراه خواهد داشت. به این ترتیب اگر لازم باشد رایانه‌های سریعتری داشته باشیم باید چیز دیگری را جایگزین فناوری سیلیکان نماییم. برای این منظور پیشنهاد می‌شود که فناوری نانوالکترونیک را جایگزین فناوری سیلیکونی کرد [۳].

پژوهش‌های جدید مبتنی بر طراحی قطعاتی بصورت الکترود-مولکول-الکترود انجام می‌شود. در حال حاضر گزینه‌های زیادی با استفاده از دستگاه‌های مولکولی از دیدگاه علوم مختلف وجود دارد مانند: پلیمرهای آلی کوچک، بیومولکول‌های طویل و بلند، نانولوله‌ها و فلورین‌ها و همچنین DNA ،که در این مقاله به بررسی خواص ترابرد گرما در مولکول DNA می‌پردازیم[٤].

مولکول DNA در الکترونیک مولکولی از دو جهت کاربرد دارد: اول بهره‌گیری از خواص منحصر به فرد، این مولکول در ساخت مدارها و دوم استفاده مستقیم از خود این مولکول به عنوان عناصر تشکیل دهنده مدارها است. پی بردن به چگونگی قوانین حاکم بر

رفتار این مولکول در مراحل ترابرد گرما و خواص گرمایی آن نقش مهمی را در ساخت وسایل جدید و بهتر کردن کارایی آنها بازی می‌کند[۵].

کارهای زیادی بر روی بررسی خواص ترابرد فونونی مولکول DNA انجام گرفته است. با این حال تاکنون بیشتر مطالعات صورت گرفته بر روی این مولکول در حضور مدهای طولی(یک بعدی) انجام گرفته است. در این مقاله، با استفاده از روش تابع گرین غیرتعادلی در چارچوب مدل نردبانی برای مولکول DNA علاوه بر مدهای طولی، مدهای عرضی را نیز درنظر گرفته و به مطالعه‌ی عددی خواص رسانندگی گرمایی مولکول DNA پرداخته می‌شود.

روش محاسبه

با توجه به پیچیدگی‌های ساختاری و شیمیایی مولکول DNA مدل‌های نظری متعددی برای بررسی چگونگی کاربرد این مولکول در قطعات الکترونیک مولکولی پیشنهاد شده است. ما در این پژوهش از مدل دوبعدی نردبانی[۶] برای توصیف خواص گرمایی این مولکول و روش تابع گرین غیرتعادلی (NEGF) برای مطالعه عددی خواص رسانندگی گرمایی از طریق مولکول استفاده شده است.

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 [۱٤]:

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

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 از حل معادله $\left[(\omega+i\eta)^{2}I-K\right]G=I$ که باز شده‌ی آن به‌صورت زیر می-باشد:

$$\begin{pmatrix}(\omega+i\eta)^{2}I-K^{L} & -V^{LC} & 0\\ -V^{CL} & (\omega+i\eta)^{2}I-K^{C} & -V^{CR}\\ 0 & -V^{RC} & (\omega+i\eta)^{2}I-K^{R}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}G^{LL} & G^{LC} & G^{LR}\\ G^{CL} & G^{CC} & G^{CR}\\ G^{RL} & G^{RC} & G^{RR}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}I & 0 & 0\\ 0 & I & 0\\ 0 & 0 & I\end{pmatrix} \qquad (۶)$$

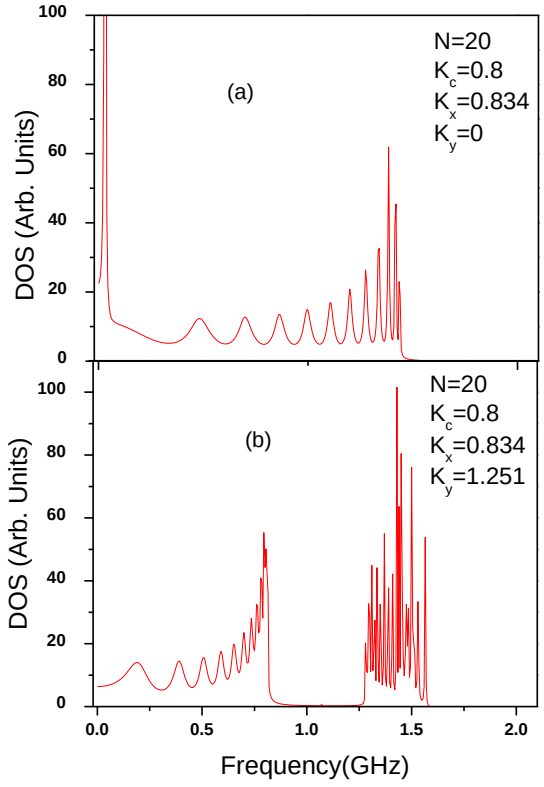
استفاد ه می‌شود.چگالی حالت فونونی را نیز می‌توان از رابطه‌ی

$$DOS=-\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}Tr[G] \qquad (۷)$$

که در آن G تابع گرین فونونی بوده، بدست آورد[۷-۸].

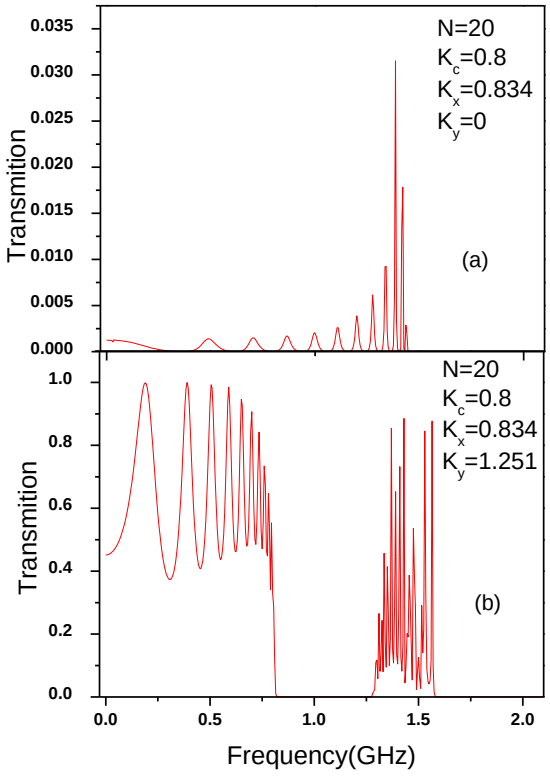
اثر حضور و عدم حضور مدهای عرضی بر خواص گرمایی سامانه

در این بخش اثر حضور و عدم حضور مدهای عرضی را بر روی چگالی حالت‌های فونونی، احتمال عبور فونون و رسانندگی گرمایی مولکول DNA برای ۲۰ زوج پایه و قدرت پیوندگاه فلز- مولکول K_c = ۰٫۸ بررسی می‌کنیم. مقداری که برای $K_{\alpha\beta}$ که ثابت فنر در پتانسیل مدل فنر است و در آن β و α نشان دهندهٔ زوج پایهٔ مورد بررسی می‌باشند در کارهای عددی ارائه شده توسط یاکوشویچ K_{AT}= ۰٫۸۳٤m/N بوده و با بررسی زوج پایه، G- C به دلیل افزایش مقدار $K_{\alpha\beta}$ که نشانگر سفتی میان پیوندهای هیدروژنی در زوج پایه‌ها است تا ۵/۱برابر(به دلیل حضور دو پیوند هیدروژنی در زوج T-A و سه پیوند در زوج G-C)است [۹].



شکل۱ : نمودار چگالی حالت‌های فونونی برحسب فرکانس برای (a) مدهای طولی و (b) مدهای طولی- عرضی در مولکول DNA .

با توجه به شکل۱ ملاحضه می‌شود که برای یک مد طولی-عرضی در فرکانس‌های ۰٫۸ تا ۱٫۲ چگالی حالتی نداریم یعنی حالت‌های مجازی در این محدوده‌ی فرکانسی وجود ندارد که با توجه به شکل ۲ عبوری هم نخواهیم داشت یعنی این دو مد اجازه‌ی عبور قونون را در این فرکانس‌ها نمی‌دهند.



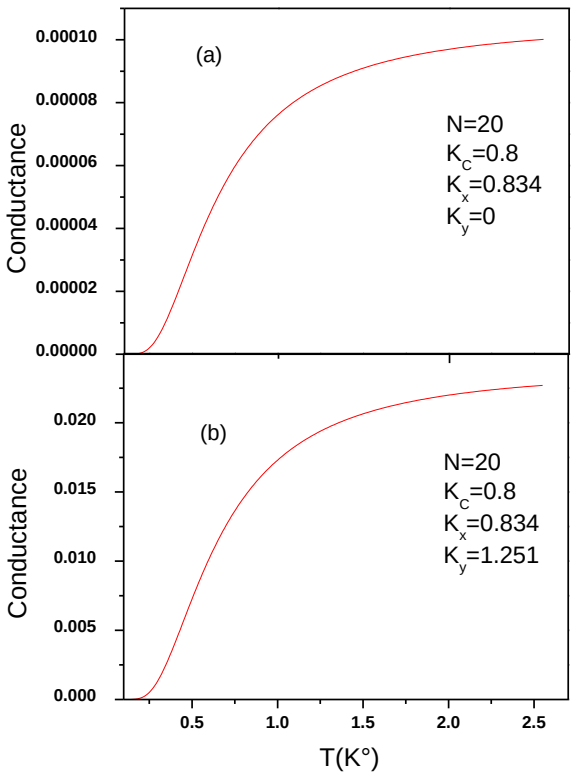
شکل۲ : نمودار گسیل فونونی مولکول DNA برای (a) مدهای طولی و (b) مدهای طولی- عرضی

برای یک مد طولی در فرکانس‌های ۰ تا ۰٫۸ ما گسیل متوسطی در حدود ۰٫۵ خواهیم داشت ولی برای مد طولی- عرضی در همین فرکانس گسیل متوسط فونونی در حدود ۰٫۷ بدست آمد.

در حضور مد طولی-عرضی احتمال عبور از فرکانس (GHZ) ۱٫٦ به بعد صفر خواهد شد در صورتی که در مد طولی این مقدار(GHZ) ۱٫٤ است.

مشاهده می‌کنیم که گسیل فونونی به چگالی حالت‌ها وابسته است با مقایسه دوشکل، هرکجا که حالت‌های فونونی وجود دارد ما احتمال عبور داریم. چگالی حالت‌های فونونی برای مولکول

DNA در حضور مد طولی – عرضی در مقایسه با حضور مد طولی، بیشتر خواهد بود پس گسیل بیشتری هم خواهیم داشت. قله های متوالی مشاهده شده در شکل۱ ناشی از پدیده‌ی تشدید است که در سامانه رخ داده است.



شکل۳ : نمودار رسانندگی بر حسب دما فرکانس برای (a) مدهای طولی و (b) مدهای طولی- عرضی در مولکول DNA .

با توجه به شکل ۳ مشاهده می‌کنیم که با وارد کردن مد عرضی به سامانه، رسانندگی گرمایی به‌طور چشمگیری افزایش می‌یابد. این افزایش بخاطر این است که دو مد در رسانش شرکت می‌کنند.

نتیجه‌گیری:

استفاده از خواص منحصر بفرد مولکول DNA در قطعات الکترونیک مولکولی آینده از جمله موضوعات پژوهشی مهم است. در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین غیرتعادلی درچارچوب مدل نردبانی برای مولکول DNA به مطالعه‌ی عددی برخی از خواص رسانندگی گرمایی این مولکول پرداخته و تاثیر وارد شدن مد عرضی بر چگالی حالت‌های فونونی، گسیل فونونی و رسانندگی گرمایی از طریق مولکول DNA بررسی شد. نتایج ما نشان می‌دهد که: ۱- مولکول DNA خاصیت نیمرسانندگی دارد ۲- چگالی حالت‌های فونونی در حضور مد طولی- عرضی در مقایسه با مد طولی بیشتر خواهد بود ۳- به تبع چگالی حالت‌های فونونی، گسیل فونونی نیز برای مد طولی و عرضی بیشتر است و همچنین رسانندگی گرمایی بسیار بالاتری خواهد داشت.

مرجع‌ها

[1] H.Queisser, Quristallene Krisen, Piper-Verlag Munchen (1958).
[2] B. T. Wong and M. P. Menguc, Thermal Transport for Application Micro/Nanomachining (Lexington, KY, USA, 2008).
[3] Michael Kruger, aus Lorrach, Deutschland, Basel (2000).
[4] Joachim, C. Gimzewski, J. K and Aviram, A.(2000). "Electronics using hybrid-molecular and mono-molecular devices." Nature. , Vol. 408, pp.541.
[5] Fink, H. W. and Schonenberger, C. (1999). "Eletrical conduction through DNA molecules." Nature. , Vol. 398, pp.407.
[6] D.Klotsa، R. A. Romer and M.S.Turners Biophysical Journal، 89، 2187(2005)
[7] Xu, Zaoli, "Thermal transport in DNA" (2015). *Graduate Theses and Dissertations.* Paper 14727
[8] M P Lopez Sancho, J M Lopez Sancho and J Rubio Instituto de Fisica de Materiales, CSIC,Serrano 144, Madrid 6, Spain
[9] S Yomosa, *Phys. Rev.* A 27(1983) 2120.