

## مولکول DNA در میدان الکتریکی خارجی: مدل SSH

سمیرا فتحی زاده<sup>۱</sup>، سهراب بهنیا<sup>۲</sup> جاوید ضیائی<sup>۳</sup>

<sup>۱</sup>دانشگاه صنعتی ارومیه، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک

### چکیده

برخی از کارهای تئوری و تجربی، ارتباط اثرهای پلارونی را با مهاجرت بار در مولکول دو رشته ای DNA پیشنهاد می کنند. در این کار، مدل Su-Schrieffer-Heeger (SSH) برای توصیف جنبه های ساختاری و پلارونی DNA بیان شده است. همچنین، از نمای لیاپانوف متوسط برای مطالعه مکانیسم انتقال بار در DNA استفاده می شود. نتایج بدست آمده از طریق نظریه نمای لیاپانوف می تواند محدوده پارامترهای میدان الکتریکی خارجی را که در آن DNA رفتار نامتعارف نشان می دهد، مشخص کند و در نتیجه بهترین محدوده این پارامترها مشخص شود. این نتایج در توافق زیادی با نتایج تجربی می باشد.

اخیرا انتقال بار الکتریکی در DNA توجه زیادی را در میان بیولوژیست ها و فیزیکدانان جلب کرده است. شواهد زیادی وجود دارد که تزریق و مهاجرت بار در DNA با آسیب، جهش و نیز تصحیح DNA همراه است [1] و از طرفی کاربردهای نانوتکنولوژی رسانایی مولکول DNA آشکار شده است. به نظر می رسد که DNA می تواند برای طراحی نانو ساختارها از جمله ابزارهای نانو الکترونیکی مولکولی، نانو سنسورها و نانومدارها مناسب باشد، همانطور که می تواند برای توالی یابی خود DNA از خواص رسانایی آن استفاده کرد [2]. برای درک مکانیسم انتقال بار در DNA، کارهای تجربی و تئوری زیادی انجام شده است. مدل های Peyrard-Bishop-Holstein (PBH) [3] و Su-Schrieffer-Heeger (SSH) [4] دو مدل موثر هستند که بر اساس حرکت پلارون برای توصیف جفت شدگی الکترونیک با پیکربندی شبکه بنا شده اند. در این کار، از مدل SSH برای مطالعه جنبه های الکترونیکی و ساختاری DNA استفاده شده است. از طرفی اثرهای محیطی بصورت نوسانات فونونی در معادلات وارد شده است. در این مدل از نظریه تقریب بستگی قوی در یک زنجیره خطی استفاده شده که با مدهای نوسانی فونونی محیط از طریق اندرکنش الکترون-فونون بصورت ضعیف جفت شده است. مدل کنونی، جابجایی های اتمی را بصورت نوسانگرهای کلاسیک و پدیده انتقال بار را با مدل نزدیک ترین همسایگی تقریب بستگی قوی مطالعه می کند. هامیلتونین در این مدل بصورت  $H = H_{SSH} + H_{ph} + H_{e-ph}$  بیان می شود. جمله اول هامیلتونین مدل SSH می باشد که بصورت زیر است:

$$H_{SSH} = \sum_n \frac{1}{2} m \dot{x}_n^2 - \sum_n [t_0 - \alpha(x_{n+1} - x_n)] [c_{n+1}^+ c_n + c_n^+ c_{n+1}] + \varepsilon_0 \sum_n c_n^+ c_n + \frac{k_s}{2} \sum_n (x_{n+1} - x_n)^2 \quad (1)$$

که در آن  $m$  جرم جفت باز،  $t_0$  ثابت جهش الکترون،  $\varepsilon_0$  انرژی تراز مولکولی،  $x_n$  جابجایی  $n$ -امین مولکول و  $c_n^+$  و  $c_n$  عملگرهای خلق و نابودی الکترون در جفت باز  $n$ -ام و  $\alpha$  ثابت جفت شدگی الکترون-فونون داخلی می باشد.  $k_s$  نیز ثابت فنر موثر برای پتانسیل نوسان هارمونیک می باشد.

دو عبارت آخر هامیلتونین مدهای نوسانی خارجی با فرکانس  $\omega_0$  و اندرکنش الکترون-فونون خارجی می باشند.

$$H_{ph} + H_{e-ph} = \omega_0 \sum_n b_n^+ b_n + \gamma_0 \sum_n c_n^+ c_n (b_n^+ + b_n) \quad (2)$$

که در آن  $b_n^+$  و  $b_n$  عملگرهای خلق و نابودی یک فونون در  $n$ -امین مکان و  $\gamma_0$  ثابت جفت شدگی الکترون-فونون خارجی می باشد. در این کار، برای بررسی اثر میدان خارجی و افزایش درجات آزادی سیستم، یک میدان الکتریکی خارجی متناوب پیشنهاد می شود که با دامنه  $E_0$  و فرکانس  $\omega$  نوسان می کند. هامیلتونین این میدان بصورت زیر خواهد بود:

$$H_{field} = -eE_0 \cos(\omega t) \sum_n n a c_n^+ c_n \quad (3)$$

معادلات حرکت متناظر با این هامیلتونین بصورت زیر است:

$$\begin{aligned} m\ddot{x}_n &= k_s(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n) - \alpha(c_n^+ c_{n-1} + c_{n-1}^+ c_n - c_{n+1}^+ c_n - c_n^+ c_{n+1}) + \xi_n(t) \\ \dot{c}_n &= -\frac{i}{\hbar} \{ \gamma_0 c_n (b_n^+ + b_n) - [t_0 - \alpha(x_{n+1} - x_n)] c_{n+1} - [t_0 - \alpha(x_n - x_{n-1})] c_{n-1} - neaE_0 \cos(\omega t) c_n \} \\ \dot{b}_n &= -\frac{i}{\hbar} (\omega_0 b_n + \gamma_0 c_n^+ c_n) \end{aligned} \quad (4)$$

که  $\xi_n(t)$  نویز گرمایی<sup>۱</sup> می باشد.

با استفاده از هامیلتونین فوق، چگالی جریان الکتریکی نیز قابل محاسبه خواهد بود.

از آنجاییکه هامیلتونین و معادلات حرکت متناظر غیرخطی بوده و حساسیت بالا به شرایط اولیه دارند، بنابراین دینامیک غیرخطی و نظریه آشوب می تواند کاندیدای مناسبی برای مطالعه این پدیده باشد. نمای لیاپانوف یکی از مشهورترین مفاهیم نظریه آشوب هست که برای اندازه گیری پایداری سیستم مورد استفاده قرار می گیرد. در سال ۱۹۹۹ نظریه نمای لیاپانوف متوسط (MLE)<sup>۲</sup> توسط شیباتا برای مطالعه آشوب در سیستم های معادلات دیفرانسیل جزئی ارائه شده است [5]. این نظریه توجه محققان در زمینه های مختلف را جلب کرده و در چندین زمینه بصورت موفق بکار برده شده است [6]. در این کار نظریه MLE برای مطالعه خواص انتقال بار در DNA از طریق مدل SSH پیشنهاد می شود. به این منظور لازم هست که ماتریس ژاکوبین محاسبه شود که ویژه مقادیر این ماتریس نمای لیاپانوف متوسط خواهد بود. برای تحلیل معادلات، کفایت که آنها را به سیستم معادلات مرتبه اول تبدیل کرده و نسبت به زمان گسسته کنیم:

$$\begin{aligned} x_n^{i+1} &= x_n^i + \Delta t u_n^i \\ u_n^{i+1} &= u_n^i + \Delta t \left\{ \frac{k_s}{m} (x_{n+1}^i + x_{n-1}^i - 2x_n^i) - \frac{\alpha}{m} (c_n^{i+} c_{n-1}^i + c_{n-1}^{i+} c_n^i - c_{n+1}^{i+} c_n^i - c_n^{i+} c_{n+1}^i) + \xi_n(t) \right\} \\ c_n^{i+1} &= c_n^i - \Delta t \frac{i}{\hbar} \{ \gamma_0 c_n^i (b_n^{i+} + b_n^i) - [t_0 - \alpha(x_{n+1}^i - x_n^i)] c_{n+1}^i - [t_0 - \alpha(x_n^i - x_{n-1}^i)] c_{n-1}^i - neaE_0 \cos(\omega t) c_n^i \} \\ b_n^{i+1} &= b_n^i - \Delta t \frac{i}{\hbar} (\omega_0 b_n^i + \gamma_0 c_n^{i+} c_n^i) \end{aligned} \quad (5)$$

در نتیجه ماتریس ژاکوبین  $4N \times 4N$  بصورت زیر خواهد بود:

$$B_{k,N} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1^{k+1}}{\partial y_1^k} & \dots & \frac{\partial y_1^{k+1}}{\partial y_N^k} & \frac{\partial y_1^{k+1}}{\partial u_1^k} & \dots & \frac{\partial y_1^{k+1}}{\partial u_N^k} & \frac{\partial y_1^{k+1}}{\partial c_1^k} & \dots & \frac{\partial y_1^{k+1}}{\partial c_N^k} & \frac{\partial y_1^{k+1}}{\partial b_1^k} & \dots & \frac{\partial y_1^{k+1}}{\partial b_N^k} \\ \frac{\partial y_1^k}{\partial y_1^k} & \dots & \frac{\partial y_1^k}{\partial y_N^k} & \frac{\partial y_1^k}{\partial u_1^k} & \dots & \frac{\partial y_1^k}{\partial u_N^k} & \frac{\partial y_1^k}{\partial c_1^k} & \dots & \frac{\partial y_1^k}{\partial c_N^k} & \frac{\partial y_1^k}{\partial b_1^k} & \dots & \frac{\partial y_1^k}{\partial b_N^k} \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial y_N^{k+1}}{\partial y_1^k} & \dots & \frac{\partial y_N^{k+1}}{\partial y_N^k} & \frac{\partial y_N^{k+1}}{\partial u_1^k} & \dots & \frac{\partial y_N^{k+1}}{\partial u_N^k} & \frac{\partial y_N^{k+1}}{\partial c_1^k} & \dots & \frac{\partial y_N^{k+1}}{\partial c_N^k} & \frac{\partial y_N^{k+1}}{\partial b_1^k} & \dots & \frac{\partial y_N^{k+1}}{\partial b_N^k} \\ \frac{\partial y_N^k}{\partial y_1^k} & \dots & \frac{\partial y_N^k}{\partial y_N^k} & \frac{\partial y_N^k}{\partial u_1^k} & \dots & \frac{\partial y_N^k}{\partial u_N^k} & \frac{\partial y_N^k}{\partial c_1^k} & \dots & \frac{\partial y_N^k}{\partial c_N^k} & \frac{\partial y_N^k}{\partial b_1^k} & \dots & \frac{\partial y_N^k}{\partial b_N^k} \\ \frac{\partial u_1^{k+1}}{\partial y_1^k} & \dots & \frac{\partial u_1^{k+1}}{\partial y_N^k} & \frac{\partial u_1^{k+1}}{\partial u_1^k} & \dots & \frac{\partial u_1^{k+1}}{\partial u_N^k} & \frac{\partial u_1^{k+1}}{\partial c_1^k} & \dots & \frac{\partial u_1^{k+1}}{\partial c_N^k} & \frac{\partial u_1^{k+1}}{\partial b_1^k} & \dots & \frac{\partial u_1^{k+1}}{\partial b_N^k} \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial u_N^{k+1}}{\partial y_1^k} & \dots & \frac{\partial u_N^{k+1}}{\partial y_N^k} & \frac{\partial u_N^{k+1}}{\partial u_1^k} & \dots & \frac{\partial u_N^{k+1}}{\partial u_N^k} & \frac{\partial u_N^{k+1}}{\partial c_1^k} & \dots & \frac{\partial u_N^{k+1}}{\partial c_N^k} & \frac{\partial u_N^{k+1}}{\partial b_1^k} & \dots & \frac{\partial u_N^{k+1}}{\partial b_N^k} \\ \frac{\partial u_N^k}{\partial y_1^k} & \dots & \frac{\partial u_N^k}{\partial y_N^k} & \frac{\partial u_N^k}{\partial u_1^k} & \dots & \frac{\partial u_N^k}{\partial u_N^k} & \frac{\partial u_N^k}{\partial c_1^k} & \dots & \frac{\partial u_N^k}{\partial c_N^k} & \frac{\partial u_N^k}{\partial b_1^k} & \dots & \frac{\partial u_N^k}{\partial b_N^k} \\ \frac{\partial c_1^{k+1}}{\partial y_1^k} & \dots & \frac{\partial c_1^{k+1}}{\partial y_N^k} & \frac{\partial c_1^{k+1}}{\partial u_1^k} & \dots & \frac{\partial c_1^{k+1}}{\partial u_N^k} & \frac{\partial c_1^{k+1}}{\partial c_1^k} & \dots & \frac{\partial c_1^{k+1}}{\partial c_N^k} & \frac{\partial c_1^{k+1}}{\partial b_1^k} & \dots & \frac{\partial c_1^{k+1}}{\partial b_N^k} \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial c_N^{k+1}}{\partial y_1^k} & \dots & \frac{\partial c_N^{k+1}}{\partial y_N^k} & \frac{\partial c_N^{k+1}}{\partial u_1^k} & \dots & \frac{\partial c_N^{k+1}}{\partial u_N^k} & \frac{\partial c_N^{k+1}}{\partial c_1^k} & \dots & \frac{\partial c_N^{k+1}}{\partial c_N^k} & \frac{\partial c_N^{k+1}}{\partial b_1^k} & \dots & \frac{\partial c_N^{k+1}}{\partial b_N^k} \\ \frac{\partial c_N^k}{\partial y_1^k} & \dots & \frac{\partial c_N^k}{\partial y_N^k} & \frac{\partial c_N^k}{\partial u_1^k} & \dots & \frac{\partial c_N^k}{\partial u_N^k} & \frac{\partial c_N^k}{\partial c_1^k} & \dots & \frac{\partial c_N^k}{\partial c_N^k} & \frac{\partial c_N^k}{\partial b_1^k} & \dots & \frac{\partial c_N^k}{\partial b_N^k} \\ \frac{\partial b_1^{k+1}}{\partial y_1^k} & \dots & \frac{\partial b_1^{k+1}}{\partial y_N^k} & \frac{\partial b_1^{k+1}}{\partial u_1^k} & \dots & \frac{\partial b_1^{k+1}}{\partial u_N^k} & \frac{\partial b_1^{k+1}}{\partial c_1^k} & \dots & \frac{\partial b_1^{k+1}}{\partial c_N^k} & \frac{\partial b_1^{k+1}}{\partial b_1^k} & \dots & \frac{\partial b_1^{k+1}}{\partial b_N^k} \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial b_N^{k+1}}{\partial y_1^k} & \dots & \frac{\partial b_N^{k+1}}{\partial y_N^k} & \frac{\partial b_N^{k+1}}{\partial u_1^k} & \dots & \frac{\partial b_N^{k+1}}{\partial u_N^k} & \frac{\partial b_N^{k+1}}{\partial c_1^k} & \dots & \frac{\partial b_N^{k+1}}{\partial c_N^k} & \frac{\partial b_N^{k+1}}{\partial b_1^k} & \dots & \frac{\partial b_N^{k+1}}{\partial b_N^k} \\ \frac{\partial b_N^k}{\partial y_1^k} & \dots & \frac{\partial b_N^k}{\partial y_N^k} & \frac{\partial b_N^k}{\partial u_1^k} & \dots & \frac{\partial b_N^k}{\partial u_N^k} & \frac{\partial b_N^k}{\partial c_1^k} & \dots & \frac{\partial b_N^k}{\partial c_N^k} & \frac{\partial b_N^k}{\partial b_1^k} & \dots & \frac{\partial b_N^k}{\partial b_N^k} \end{bmatrix}$$

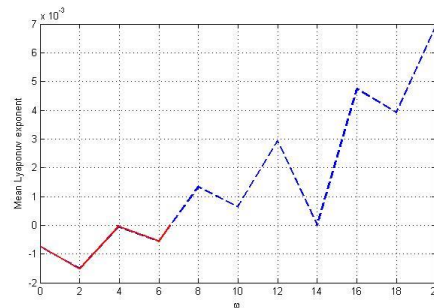
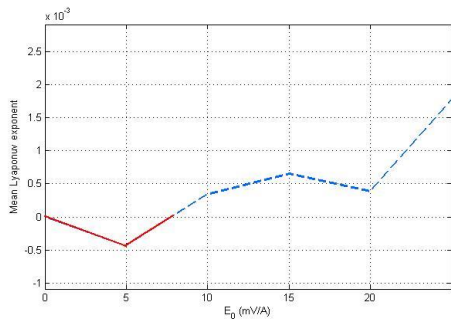
<sup>1</sup> Thermal noise  
<sup>2</sup> Mean Lyapunov exponent

که با استفاده از آن نمای لیاپانوف متوسط بصورت زیر بیان می شود:

$$\lambda_k = \frac{1}{N} \ln |B_{k,N}| \quad (5)$$

که  $|B_{k,N}|$  دترمینان ماتریس  $B_{k,N}$  می باشد. براساس تعریف، نمای لیاپانوف مثبت نشان دهنده ناپایداری سیستم است در حالیکه مقدار منفی آن، پایداری سیستم را مشخص می کند.

با تحلیل نظریه MLE، حساسیت نمای لیاپانوف نسبت به پارامترهای میدان مشخص می شود. شکل 1 و 2 تغییرات نمای لیاپانوف را برحسب دامنه و فرکانس میدان الکتریکی خارجی نتیجه می دهند تا محدوده ای که DNA رفتارهای غیرمعمول نشان می دهد، مشخص شود و در نتیجه بهترین مقادیر پارامترهای سیستم انتخاب شوند.



شکل 1: تغییرات نمای لیاپانوف بر حسب فرکانس میدان الکتریکی  
 شکل 2: تغییرات نمای لیاپانوف بر حسب دامنه میدان الکتریکی  
 مطابق نتایج فوق، انتقال جریان در میدان های الکتریکی با دامنه بیشتر از حدود  $8 (mV/A^\circ)$  و فرکانس های بالای  $7 (Hz)$  موجب ناپایداری سیستم می شود که این مسئله باید در مطالعه رسانایی مولکول DNA و در نتیجه طراحی نانو ابزارهای الکترونیکی از آن مورد توجه قرار گیرد.

### نتیجه گیری

با ملاحظه رفتار MLE رابطه بین پارامترهای سیستم و الگوی فضایی آن تخمین زده می شود. رشد MLE متناظر با افزایش بی نظمی سیستم است، پس بهترین محدوده پارامترها مقادیری است که نمای لیاپانوف مقادیر کمینه به خود می گیرد و در نتیجه سیستم پایدار است. در این کار، مطابق این نظریه محدوده پایداری سیستم DNA در اثر اعمال میدان الکتریکی خارجی بیان می شود که موضوع مهمی در مطالعه رسانایی و الکترونیک DNA می باشد. این نتایج در توافق زیادی با نتایج تجربی می باشند. بنابراین استفاده از نظریه آشوب می تواند افق های جدیدی را به روی مطالعه مکانیسم انتقال بار الکتریکی در DNA بگشاید و ابزار نیرومندی برای تحلیل سیستم باشد.

### مرجع ها

1. S.O. Kelley and J. K. Barton. Electron transfer between bases in double helical DNA. *Science* **283** (1999).
2. B. M. Venkatesan and R. Bashir. Nanopore sensors for nucleic acid analysis. *Nature Nanotechnology* **6.10** (2011).
3. S. Komineas, G. Kalosakas and A. R. Bishop. Effects of intrinsic base-pair fluctuations on charge transport in DNA. *Physical Review E* **65.6** (2002).
4. W. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger. Solitons in polyacetylene. *Physical Review Letters* **42.25** (1979).
5. H. Shibata. Lyapunov exponent of partial differential equation. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **264.1**(1999).
6. S. Behnia and et al. A novel approach for the potential parameters selection of Peyrard–Bishop model. *Physics Letters A* **375.7** (2011).