

طراحی و کنترل یک ترانزیستور مولکولی DNA

بهنیا، سهراب؛ فتحی زاده، سمیرا

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه

چکیده

الکترونیک مولکولی عملگرهای الکترونیکی متفاوتی را ارائه می دهد که بدست آوردن آنها در فناوری متداول مشکل است. در این کار، یک ترانزیستور مولکولی برمبنای مولکول های DNA طراحی و کنترل می شود. بدین منظور، یک ابزار الکتریکی سه پایه خلق می شود که دو پایه آن الکترودهای فلزی هستند که به یک اختلاف پتانسیل متصل اند و پایه سوم، زنجیره DNA متصل به ولتاژ گیت است. از طریق مطالعه آماری توزیع ترازهای نزدیک ترین همسایگی که یکی از ابزارهای آشوب کوانتومی است، خواص انتقال سیستم بررسی می شود. نتایج نشان می دهند که کنترل انتقال الکتریکی می تواند از طریق تنظیم پارامترهای حمام گرمایی که برای شبیه سازی محیطی که سیستم در آن غوطه ور است، بکار برده شده، صورت بگیرد. بنابراین، می توان از طریق تنظیم یک پارامتر ناحیه ای که در آن ترانزیستور با راندمان مناسب کار می کند را بدست آورد.

Designing and Controlling of a DNA Molecular transistor

Behnia, Sohrab; Fathizadeh, Samira

Department of Physics, Faculty of Science, Urmia University of Technology, Urmia

Abstract

Molecular electronics induces electronic functions which are difficult to obtain with conventional technology. In this work, a molecular transistor based on DNA molecules is designed and controlled. In this regard, a tripod electrical device is created which two bases are the metal leads which connected to a potential difference and third base is DNA chain connected to a gate voltage. Via the statistical studying of the nearest neighbor level distribution which is one of the quantum chaos tools, the transport properties of the system is investigated. The obtained results show that one can control the electronic transport through the setting of thermal bath parameters used for simulation of the environment which system is embedded in it. Therefore, we can choose the appropriate range for increasing the efficiency of molecular transistor via the setting of only bath parameters.

PACS No. 72, 73, 81, 89

گیرند. مولکول های DNA با ویژگی خودچیدمانی^۱ برنامه پذیر بودن و انعطاف پذیری می توانند بعنوان یک چارچوب در نانو ساختارها مورد استفاده قرار گیرند که منجر به خلق مدارها و تراشه های الکترونیکی در ابعاد نانو خواهد شد. هدف از این کار، طراحی یک ترانزیستور برمبنای مولکول های DNA و مهندسی آن می باشد. به این منظور زنجیره ای از مولکول های DNA را بین دو الکتروده فلزی قرار داده و اختلاف ولتاژ V_b را بین دو انتها برقرار می کنیم. به این ترتیب که یکی از پایانه ها به ولتاژ $V_b/2$ و پایانه دوم به ولتاژ $-V_b/2$ متصل می شود. برای طراحی ترانزیستور الکتریکی بعنوان یک ابزار سه پایه، مولکول های DNA نیز به یک ولتاژ گیت متصل می شود. برای بررسی اثرات

مقدمه

در سال های اخیر، ترانزیستورهای مولکولی بدلیل ویژگی های منحصر بفرد خود، توجه زیادی را به خود جلب کرده اند [۱]. طراحی یک ترانزیستور مولکولی، مهندسی و کنترل آن موضوع مورد علاقه بسیاری از محققان بوده است [۲]. مواد مولکولی نیز بعلاوه انعطاف پذیری، هزینه پایین و امکان سنتز راحت تر کاربردهای فراوانی در نانوالکترونیک یافته اند [۳]. در این میان، مواد بیولوژیکی مثل مولکول های پروتئین و DNA که سازگار با محیطهای فیزیولوژیکی مثل بدن انسان هستند، می توانند در طراحی ابزارهای نانوالکترونیکی مورد استفاده در پزشکی مورد استفاده قرار

^۱ Self - assembled

H_{Lead} هامیلتونی متناظر با الکترودهاست که با رابطه زیر توصیف می شود[۸]:

$$H_{Lead} = \sum_{j=1}^2 \sum_k (\varepsilon_{L_{k,j}} + eV_b/2) a_{L_{k,j}}^+ a_{L_{k,j}} + \sum_{j=1}^2 \sum_k (\varepsilon_{R_{k,j}} - eV_b/2) a_{R_{k,j}}^+ a_{R_{k,j}} \quad (۳)$$

بطوریکه $a_{i,j}^+$ عملگر خلق (فنا) الکترون در سایت (k,j) ، $\varepsilon_{\beta,j}$ انرژی در سایت مربوط به الکتروده $\beta=L,R$ و $\beta=L,R$ ولتاژ بایاس می باشد. جمله سوم هامیلتونی، برهمکنش بین الکترودها و DNA را بیان می کند که بصورت زیر است[۸]:

$$H_{DNA-Lead} = \sum_{j=1}^2 \sum_k (t_L a_{L_{k,j}} c_{1,j} + t_R a_{R_{k,j}} c_{N,j} + H.c.) \quad (۴)$$

که t_β انرژی جهش الکترون بین DNA و الکترودها می باشد. تاثیر محیط خارجی و اندرکنش آن با سیستم به ترتیب با جملات

H_{Bath} و $H_{DNA-Bath}$ در هامیلتونی سیستم وارد می شود[۹]:

$$H_{Bath} = \sum_{i=1}^N \hbar \omega_i b_i^+ b_i + 2 \sum_{i=1}^{N-1} (\hbar \Omega_i b_i^+ b_{i+1} + H.c.) \quad (۵)$$

$$H_{DNA-Bath} = \sum_{j=1}^2 \sum_{i=1}^N (t_i b_i^+ c_{i,j} + H.c.) \quad (۶)$$

که $b_{i,j}^+$ عملگر خلق (فنا) یک فونون، ω_i و Ω_i فرکانس های زنجیره نوسانگرهایی که بعنوان حمام گرمایی مدل سازی شده اند و ثابت های برهمکنش آنها می باشد. در حالت کلی، فرکانس های نوسانی حمام در یک رابطه تابع طیفی بصورت زیر صدق می کنند:

$$J(\omega) = \sum_I t_i^2 \delta(\omega - \omega_i) = J_0 \left(\frac{\omega}{\omega_c}\right)^s e^{-\omega/\omega_c} \Theta(\omega) \quad (۷)$$

که ω_c فرکانس قطع و $\Theta(\omega)$ تابع هویساید^۳ می باشد. در این کار، یک حمام اهمی با $s=1$ در نظر گرفته شده است[۱۰].

در این کار یک زنجیره DNA دو رشته ای با N جفت باز در نظر گرفته می شود که از دو انتها به الکترودهایی با k سایت متصل شده و هر رشته حمام به یک رشته نوسانگر بعنوان حمام گرمایی متصل می شود. بنابراین، یک ماتریس حمام $(4N+4k) \times (4N+4k)$ بعنوان یک ماتریس تصادفی تولید می شود که برای تحلیل آن می توان از روش توزیع آماری ترازاها استفاده کرد. یکی از این ابزارها، توزیع فاصله ترازای $(P(s))$ که s

محیطی، مولکول های DNA در یک حمام گرمایی غوطه ور می شود. هدف از این کار، مهندسی سیستم برای بدست آوردن راندمان مناسب می باشد. برای این منظور از ابزار آشوب کوانتومی برای بررسی حالت های سیستم استفاده می شود. یکی از این ابزارها، توزیع ترازهای نزدیک ترین همسایگی^۲ $P(s)$ می باشد[۴]. این ابزار می تواند حالت های جایگزیده (حالت عایق) و حالت های غیرجایگزیده (رسانا) را از هم تمیز دهد. اگر توزیع احتمال تراز های نزدیک ترین همسایه به صورت پواسونی باشد، بروز حالت جایگزیده و در صورتی که توزیع احتمال بصورت ویگنری باشد، بروز حالت غیرجایگزیده محتمل خواهد بود[۵]. بدین ترتیب، می توان حالت هایی را که در آن DNA می تواند بعنوان یک کانال هادی عمل کرده و جریان الکتریکی را برقرار سازد تشخیص داد.

مدل سازی ریاضی و روش تحلیل سیستم

مدل ریاضی یک ترانزیستور مولکولی که شامل زنجیره های DNA بین دو الکتروده می باشد و به یک گیت ولتاژ متصل شده و در تماس با یک حمام گرمایی قرار دارد می تواند بصورت زیر باشد[۶]

$$H = H_{DNA} + H_{Lead} + H_{DNA-Lead} + H_{Bath} + H_{DNA-Bath} \quad (۱)$$

که در آن H_{DNA} ، هامیلتونی زنجیره های می باشد که با استفاده از مدل تنگ بست برای یک سیستم دورشته ای بصورت زیر نوشته می شود[۷]:

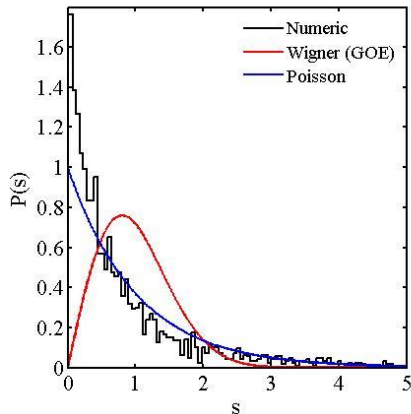
$$H_{DNA} = \sum_{j=1}^2 \left(\sum_{i=1}^N (\varepsilon_{i,j} + eV_g) c_{i,j}^+ c_{i,j} - \sum_{i=1}^{N-1} (t_{i,i+1} c_{i,j}^+ c_{i+1,j} + H.c.) \right) + \sum_{i=1}^N (\lambda c_{i,1}^+ c_{i,2} + H.c.) \quad (۲)$$

که در آن $c_{i,j}^+$ عملگر خلق (فنا) الکترون در سایت (i,j) ، $\varepsilon_{i,j}$ انرژی در سایت مربوط به یک الکترون در سایت i -ام از رشته j -ام می باشد. انرژی جهش الکترون بین سایت ها در یک رشته، λ انرژی جهش الکترون بین رشته ها و V_g ولتاژ گیت می باشد.

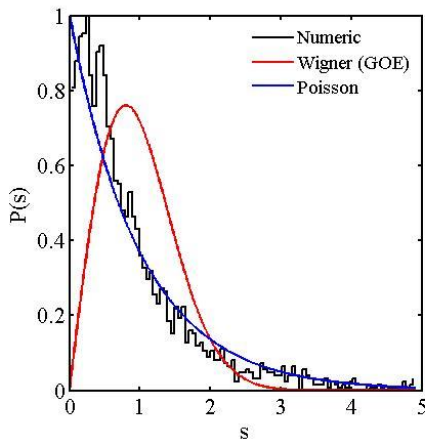
^۳ Heaviside function

^۲ Nearest neighbor level distribution

دهیم. محتوای G-C به شدت خواص الکتریکی DNA را تحت تاثیر قرار می دهد. DNA بعنوان یک نیمه رسانا با گاف انرژی عریض رفتار می کند که گاف انرژی با افزایش تعداد G-C افزایش می یابد. این نقش جفت باز G-C بعلت پایین بودن پتانسیل الکتروشیمیایی گوانین نسبت به سایر بازها قابل مشاهده است [۱۵].



شکل ۱: توزیع ترازهای نزدیک ترین همسایگی، $J_0/\omega_c = 3$. مشاهدات برمبنای $P(s)$ نشان می دهند که به ازای مقادیر $J_0/\omega_c = [1-3]$ ، سیستم دارای رفتار پواسونی است. شکل ۱، توزیع ترازهای نزدیک ترین همسایگی را به ازای $J_0/\omega_c = 3$ نشان می دهد که در محدوده عملکردی یک کانال عایق است. از مقدار $J_0/\omega_c = 4$ سیستم وارد فاز گذار می شود (شکل ۲).



شکل ۲: توزیع ترازهای نزدیک ترین همسایگی، $J_0/\omega_c = 4$. این مقدار از پارامتر، می تواند بعنوان نقطه شروع عملکرد ترانزیستور دارای کانال عبوری در نظر گرفته شود. به تدریج، مقدار پارامتر J_0/ω_c را افزایش می دهیم. در این مقادیر، سیستم به

فاصله ترازهای مجاور طبق رابطه $s = E_{i+1} - E_i$ می باشد. در فاز فلزی، $P(s)$ نزدیک به نظریه ماتریس های تصادفی^۴ ارائه شده توسط ویگنر^۵ و دایسون^۶ می باشد. در رژیم عایق، ترازهای الکترونی حالت های جایگزیده مانند متغیرهای تصادفی نوسان می کنند و مطابق قانون پواسون^۷ توزیع می شوند. زمانی که نوسانات اتمی یا پتانسیل ناخالصی افزایش می یابد، سیستم کوانتومی تحت تاثیر یک گذار فاز مرتبه دوم قرار می گیرد. در فیزیک حالت جامد، این گذار به گذار فلز-عایق یا گذار بین حالت های جایگزیده و غیر جایگزیده شهرت دارد [۱۱]. در این کار، هدف ما این است که با استفاده از ابزار $P(s)$ و مطالعه توزیع ترازها به طراحی یک ترانزیستور مولکولی با راندمان بالا بپردازیم.

نتایج

توانایی DNA برای انتقال بار بلندبرد، آنرا به کاندید مناسبی برای استفاده در نانوالکترونیک تبدیل کرده است. پارامترهای مورد استفاده در مدل مذکور به صورت زیر می باشند: $\varepsilon_A = 8.5$, $\varepsilon_C = 8.9$, $\varepsilon_G = 8.3$, $\varepsilon_T = 9$ eV مرتبط به هر کدام از بازها، $t_{TT} = 0.14$, $t_{CC} = 0.05$, $t_{AA} = 0.22$, $t_{GG} = 0.11$ eV جهش الکترون بین بازهای یکسان، $t_{xy} = \frac{t_{xx} + t_{yy}}{2}$ انرژی جهش الکترون بین بازهای متفاوت و $\lambda = -0.3$ eV انرژی جهش الکترون بین دو رشته می باشد [۱۲-۱۳]. از طرفی، $\varepsilon_{\beta_{k,j}} = 7.75$ eV, $t_{\beta} = 0.42$ eV به ترتیب انرژی در سایت الکترودها و انرژی جهش الکترون بین الکترودها و DNA است [۱۴].

در اینجا، ما سعی می کنیم که حالت های مختلف انتقال بار از کانال DNA را با تغییر پارامترهای حمام که کانال در آن غوطه ور است، بررسی کنیم. برای این کار یک توالی با جفت بازهای G-C را در نظر می گیریم و پارامتر J_0/ω_c حمام را از ۱ تا ۴۰ تغییر می

^۴ Random matrix

^۵ Wigner

^۶ Dyson

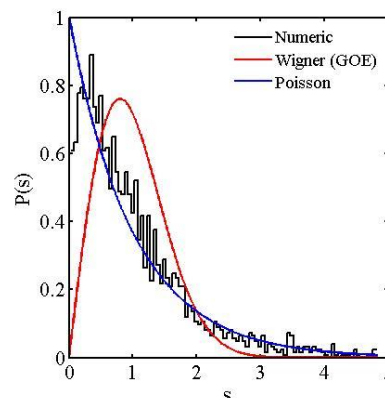
^۷ Poisson

زنجیره DNA طراحی و تنظیم کنیم. برای این کار، زنجیره ای از جفت بازهای G-C را بین دو الکترود فلزی با اختلاف ولتاژ V_b قرار داده و پایه سوم (DNA) را به ولتاژ گیت متصل می کنیم. مولکول های DNA در تماس با حمام گرمایی قرار دارند. با استفاده از ابزار مطالعه ترازهای الکترونی، مشاهده می شود که پارامتر حمام کلید مناسبی برای تنظیم عملکرد ترانزیستور می باشد.

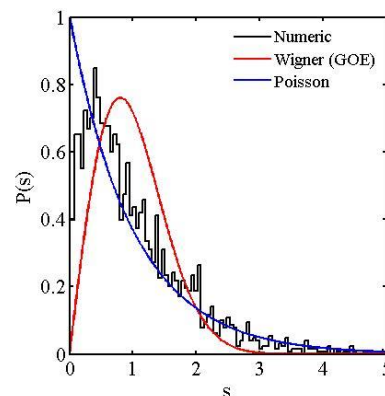
مرجع ها

- [1] C. W. Tseng, D. C. Huang, Y. T. Tao; "Organic Transistor Memory with a Charge Storage Molecular Double-Floating-Gate Monolayer"; *ACS applied materials & interfaces*, **7** (2015) 9767-9775.
- [2] J. Martínez-Blanco, C. Nacci, S. C. Erwin, K. Kanisawa, E. Locane, M. Thomas, F. von Oppen, P. Brouwer, S. Fölsch, "Gating a Single-Molecule Transistor with Individual Atoms"; *Nature Physics*, **11**, (2015) 640.
- [3] S. Liu, W. M. Wang, A. L. Briseno, S. C. B. Mannsfeld, Z. N. Bao, "Controlled Deposition of Crystalline Organic Semiconductors for Field-Effect-Transistor Applications"; *Advanced Materials*, **21** (2009) 1217-1232.
- [4] M. L. Mehta, *Random Matrices*; Academic Press, Boston, 1991, 523.
- [5] I. Kh. Zharekeshv, B. Kramer, "Asymptotics of Universal Probability of Neighboring Level Spacings at the Anderson Transition"; *Physical Review Letters*, **79** (1997) 717-721.
- [6] S. Behnia, S. Fathizadeh, J. Ziaei, "Controlling Charge Current through a DNA Based Molecular Transistor"; *Physics Letters A* **38** (2017) 36-43.
- [7] E. Díaz, A. Sedrakyan, D. Sedrakyan, F. Domínguez-Adame, "Absence of Extended States in a Ladder Model of DNA"; *Physical Review B*, **75** (2007) 014201.
- [8] Z. Z. Chen, R. Lü, B. F. Zhu, "Effects of Electron-Phonon Interaction on Nonequilibrium Transport through a Single-Molecule Transistor"; *Physical Review B*, **71** (2005) 165324.
- [9] F. Nicacio, A. Ferraro, A. Imparato, M. Paternostro, F. L. Semião, "Thermal Transport in Out-of-Equilibrium Quantum Harmonic Chains"; *Physical Review E*, **91** (2015) 042116.
- [10] R. Gutiérrez, S. Mandal, G. Cuniberti, "Dissipative Effects in the Electronic Transport through DNA Molecular Wires"; *Physical Review B*, **71** (2005) 235116.
- [11] B. I. Shklovskii, B. Shapiro, B. R. Sears, P. Lambrianides, H. B. Shore, "Statistics of Spectra of Disordered Systems Near the Metal-Insulator Transition"; *Physical Review B*, **47** (1993) 11487.
- [12] A. B. Trofimov, J. Schirmer, V. B. Kobychyev, A. W. Potts, D. M. P. Holland, L. Karlsson, "Photoelectron Spectra of the Nucleobases Cytosine, Thymine and Adenine"; *Journal of Physics B*, **39** (2006) 305.
- [13] K. Senthilkumar, F. C. Grozema, C. F. Guerra, F. M. Bickelhaupt, F. D. Lewis, Y. A. Berlin, M. A. Ratner, L. D. A. Siebbeles, "Absolute Rates of Hole Transfer in DNA"; *Journal of American Chemical Society*, **127** (2005) 14894.
- [14] S. Malakooti, E. R. Hedim, Y. D. Kim, Y. S. Joe, "Enhancement of charge transport in DNA molecules induced by the next nearest-neighbor effects"; *Journal of Applied Physics*, **112** (2012) 094703.
- [15] M. Di Ventra, M. Zwolak, "DNA Electronics in *Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology*, American Scientific Publishers, 2004.

تدریج فاز گذار را رد کرده و وارد حالت کانال رسانا می شود (شکل های ۳ و ۴).



شکل ۳: توزیع ترازهای نزدیک ترین همسایگی، $J_0/\omega_c = 5$. در شکل ۳، سیستم در حال عبور از فاز گذار می باشد و به حالت ویگنری (حالت غیرجایگزیده) نزدیک می شود.



شکل ۴: توزیع ترازهای نزدیک ترین همسایگی، $J_0/\omega_c = 40$. روند گذار به سمت حالت ویگنری ادامه پیدا می کند تا به ازای $J_0/\omega_c = 40$ می توان حالت بسیار نزدیک به حالت رسانایی را مشاهده کرد (شکل ۴). واضح است که پارامتر حمام بعنوان یک پارامتر برای مهندسی کانال ترانزیستور مورد استفاده قرار گرفته است و می تواند پارامتر مناسبی برای تنظیم و کنترل عملکرد آن باشد.

نتیجه گیری

همزمان با تلاش برای کوچک کردن ابزارهای الکترونیکی، استفاده از زنجیره های DNA برای خلق اجزای مدارهای الکترونیکی مثل سیم ها، دیود و ترانزیستور پیشنهاد شده است. در این کار، ما تلاش کرده ایم که یک ترانزیستور مولکولی بر مبنای