

The study of thermoelectric effect on the nonlinear response regime: the appearance of negative differential thermoelectric resistance and thermoelectric rectifier in DNA

Robabeh Panahinia*, Sohrab Behnia

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

Received: 17.12.2018 Final revised: 19.08.2019 Accepted: 28.10.2019

DOI: 10.22055/jrmbms.2019.14915

Abstract

Sources of renewable energy are a major global concern for researchers. In recent years, the generation of thermoelectric power from waste heat has appeared as a green and clean energy competitor. Beyond the linear response regime, nonlinear thermoelectric phenomena such as negative differential thermoelectric resistance (NDTER) and thermoelectric rectification constitute a new area of research, anticipated to enhance thermoelectric response. Organic thermoelectric materials (TM) have emerged as superior TMs, since they are non-toxic, eco-friendly, and low-cost. Herein, bio-organic materials provide a unique opportunity in developing bio-degradable, flexible and smart TM. In this work, we describe nonlinear phonon-thermoelectric DNA-based nano devices driven by temperature biases. Remarkably, we found that by applying a temperature difference between the source and the drain, the sensible electric current is generated. The temperature of hot thermostat and the temperature bias are considered as a control parameter. By modulating the temperature bias, NDTER phenomenon can be achieved. NDTER is used to refer to a phenomenon in which the charge current decreases by increasing the temperature bias. Moreover, by fixing the temperature bias between cold and hot reservoirs and varying the temperature of hot reservoir, the charge currents are different for the forward and reverse direction of ΔT . This is what is called a thermoelectric rectification.

Keywords: DNA, Bio-organic thermoelectric, thermoelectric rectification, Negative differential thermoelectric resistance

* Corresponding r.panahinia@sci.uut.ac.ir



مطالعه اثر ترموالکتریک در رژیم پاسخ غیرخطی: بروز مقاومت دیفرانسیلی ترموالکتریک منفی و یکسوسازی جریان ترموالکتریکی

ربابه پناهی نیا^{*}، سهراب بهنیا

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

دریافت: 1397/09/26 ویرایش نهائی: 1398/05/28 پذیرش: 1398/08/06

DOI: 10.22055/jrmb.2019.14915

چکیده

جستجو برای یافتن چشمه‌های انرژی تجدیدپذیر تبدیل به چالش مهمی در پیش روی محققان شده است. در سال‌های اخیر، ترموالکتریسیته (TM) به‌عنوان یک مولد انرژی الکتریکی پاک و سبز شناخته شده است. پدیده‌های ترموالکتریک در رژیم غیرخطی حوزه جدیدی در تحقیقات را تشکیل می‌دهند که پیش‌بینی می‌شود کارآیی ترموالکتریک را افزایش بدهند. به‌نظر می‌رسد مواد ترموالکتریک ارگانیک به دلیل دارا بودن ویژگی‌های خاص خود، فرصت منحصر به فردی را در توسعه مواد ترموالکتریک تجزیه پذیر زیستی، انعطاف پذیر و هوشمند فراهم می‌کنند. در این مطالعه، ترموالکتریک غیرخطی مبتنی بر نانومولکول دی.ان.آ را توصیف می‌کنیم. مشاهده می‌شود که با اعمال اختلاف دما بین منبع و گیرنده، جریان الکتریسیته محسوسی تولید می‌شود. با تنظیم اختلاف دما، پدیده مقاومت دیفرانسیلی ترموالکتریک منفی (NDTER) را می‌توان به دست آورد. NDTER به پدیده‌ای اشاره دارد که در آن جریان الکتریکی با افزایش اختلاف دما کاهش می‌یابد. علاوه بر این، با تنظیم تفاوت دما بین مخازن سرد و گرم و تغییر درجه حرارت مخزن داغ، جریان‌های بار در دو جهت متضاد ΔT متفاوت است. این چیزی است که یکسوساز ترموالکتریک نامیده می‌شود.

کلیدواژگان: دی.ان.آ، ترموالکتریک ارگانیک زیستی، یکسوساز ترموالکتریک، مقاومت دیفرانسیلی ترموالکتریک منفی

مقدمه

زیست‌شناختی، مانند رونویسی² [1] و تکثیر [2] مورد توجه می‌باشد.

دی.ان.آ یک پلیمر متشکل از زیرواحدهای نوکلئوتید می‌باشد. هر نوکلئوتید ترکیبی از سه زیر واحد قند 5 کربنه، بازهای آلی و گروه فسفات می‌باشد. بازهای آلی

دی.ان.آ¹ یکی از مولکول‌های بیولوژیکی جالب و پررمز و راز طبیعت است. این مولکول متعلق به دسته پلیمرهای زیستی می‌باشد و دارای یک عملکرد بیولوژیکی بسیار مهم است که شامل توانایی ذخیره و انتقال اطلاعات ژنتیکی می‌باشد. اساساً دینامیک ساختاری دی.ان.آ به دلیل مرتبط بودن آن به پروسه‌های

* نویسنده مسئول: r.panahinia@sci.uut.ac.ir

¹ DNA

² Transcription



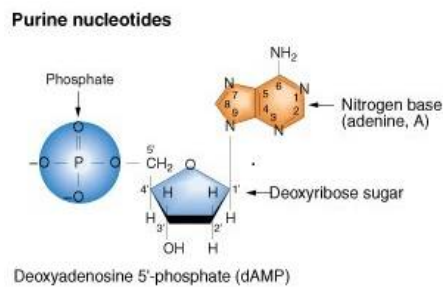
دی.ان.آ در ساخت دستگاه‌های کاربردی نانومقیاس مانند الگویی برای دستگاه‌های الکترونیکی [3] و موتورهای مولکولی استفاده شده است [4].

به طرز شگفت‌انگیزی، خواص فوق‌العاده دی.ان.آ آن را به عنوان یک نانوسیم مورد توجه در فن‌آوری‌های آینده مطرح کرده است. به‌طور ذاتی، هدایت حرارتی دی.ان.آ دارای خصوصیت همسانگردی است. مهمتر از همه، پلیمر دی.ان.آ دارای قابلیت انعطاف‌پذیری بی‌نظیر، حتی در مقیاس طول‌های کوتاه است [5]. بنابراین، توجه بسیار زیادی به پلیمرهای دی.ان.آ هم از جنبه تئوری و هم از جنبه کاربردی جلب شده است [6,7]. از سوی دیگر، یافتن منابع انرژی‌های تجدیدپذیر، یکی از دغدغه‌های عمده محققان در جهان امروزه است. محیطی جهانی آن موجب شده تا محققان روش‌های جایگزینی را برای استفاده از سوخت‌های فسیلی با منابع جایگزین انرژی تجدیدپذیر و پایدار توسعه دهند [8-11].

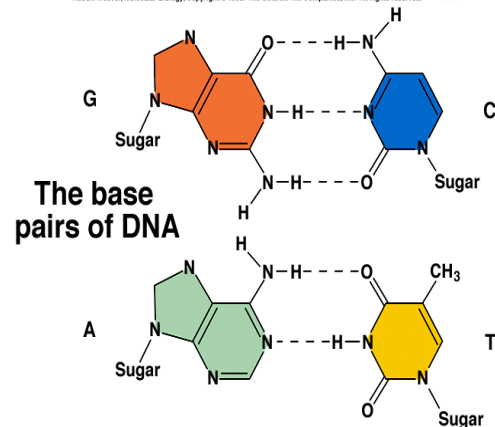
در سال‌های اخیر، در میان فن‌آوری‌های مبتنی بر انرژی‌های تجدیدپذیر، ترموالکتریسته (تولید انرژی الکتریکی از گرمای اتلاف شده) به‌عنوان یک گزینه مهم برای انرژی سبز و پاک پیشنهاد شده است [12].

مواد مختلفی در دستگاه‌های ترموالکتریک استفاده شده است. برای کاربردهایی در درجه حرارت نزدیک به دمای اتاق، از قبیل تبرید و بازیافت گرمای اتلافی تا دمای 500 کلوین، آلیاژهای Sb_2Te_3 و Bi_2Te_3 برای نیم‌رساناهای نوع n و p استفاده شده است. برای تولید انرژی الکتریکی در دماهای متوسط (900-500 کلوین)، موادی مبتنی بر عنصر تلوراید گروه IV مانند $PbTe$ ، $GeTe$ و یا $SnTe$ به‌طور معمول استفاده می‌شود، [13 و 14] در درجه حرارت‌های بالاتر ($T > 900 K$).

به چهار دسته، شامل آدنین¹، گوانین²، تیمین³ و سیتوزین⁴ تقسیم‌بندی می‌شوند. اتصال نوکلئوتیدها به هم تشکیل یک رشته نوکلئوتید می‌دهد. نام‌گذاری هر نوکلئوتید بر اساس نوع باز آلی موجود در نوکلئوتید انجام می‌شود. دو رشته نوکلئوتید در مقابل هم، از طریق پیوندهای هیدروژنی مابین بازهای آلی طبق اصل مکملی، به هم پیوند می‌خورند و این تشکیل یک زنجیره دی.ان.آ را می‌دهد. شکل 1 ساختار شماتیک یک واحد نوکلئوتیدی و پیوندهای هیدروژنی بین نوکلئوتیدها را در یک زنجیره دی.ان.آ نشان می‌دهد.



Robert Weaver, Molecular Biology, Copyright © 1999, The McGraw-Hill Companies, Inc. All rights reserved.



شکل 1. الف: ساختار یک نوکلئوتید نوع A. ب: اتصال نوکلئوتیدها از طریق پیوندهای هیدروژنی طبق اصل مکملی.

³ Timin

⁴ Cytosine

¹ Adenin

² Guanin

در این مقاله، جریان الکتریکی و فونونی ناشی از دما را در یک شبکه از توالی‌های دی.ان.آ بررسی می‌کنیم. بخش 2 مدل دینامیکی معرفی شده برای توصیف نوسانات جفت پایه و برهم‌کنش آن با حامل‌های بار را توصیف می‌کند. نتایج در بخش 3 ارائه شده است. بخش 4 به نتیجه‌گیری اختصاص داده شده است.

مدل

هنگامی که یک گرادیان حرارتی در طول یک دستگاه ترموالکتریک اعمال می‌شود، جریان الکتریکی و همچنین جریان حرارتی در طول دستگاه تولید می‌شود. در رژیم فوریه³، جریان گرما متناسب با گرادیان درجه حرارت می‌باشد که ضریب تناسب برابر با هدایت حرارتی ماده می‌باشد:

$$J_Q = -\kappa \nabla T \quad 1$$

بایستاری جریان انرژی حرارتی، معادله پیوستگی را ایجاب می‌کند:

$$\frac{dh(x,t)}{dx} + \frac{\partial j(x,t)}{\partial t} = 0, \quad 2$$

که در آن $h(x,t)$ چگالی انرژی را توصیف می‌کند. با مشتق‌گیری از چگالی انرژی، جریان گرمای موضعی را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$j_n = -\left\langle \dot{y}_n \left(\frac{\partial H(y_n, y_{n+1})}{\partial y_n} \right) \right\rangle \quad 3$$

به همین ترتیب، در پاسخ به گرادیان دما، حامل‌های بار از حالت پایه خود حرکت می‌کنند تا در یک انتهای سیستم تجمع یابند. بنابراین، جریان بار و در نتیجه اختلاف ولتاژ در طول دستگاه تولید می‌شود. شارش جریان بار ناشی از اختلاف دما، پایه اثر سبک ترموالکتریک است. در رژیم خطی مربوط به گرادیان دمای پایین، اختلاف پتانسیل الکتریکی به وجود آمده دقیقاً متناسب با اختلاف دمای اعمال شده در سیستم

مولدهای ترموالکتریک در هر دو پایه نوع n و p معمولاً از آلیاژهای $Si-Ge$ استفاده می‌کنند [15].

تقریباً تمام مواد مورد بحث در بالا، نیمه‌هادی‌هایی هستند که از عناصر سنگین تشکیل شده‌اند که یا سمی هستند و یا فراوانی کمی در طبیعت دارند. این محدودیت‌ها گسترش پایدار مواد ترموالکتریک را در اندازه‌های بزرگ مقیاس محدود می‌کند، حتی اگر آنها دارای کارایی بالایی باشند [16-18]. از طرفی، بسیاری از فرآیندهای ساخت پیچیده و پرهزینه هستند. در مقابل، مواد ترموالکتریک زیستی مانند دی.ان.آ دارای مزیت‌هایی مانند غیرسمی بودن، سازگاری با محیط زیست، انعطاف‌پذیری و هزینه پایین تولید می‌باشند. همچنین با توجه به هدایت حرارتی بسیار پایین دی.ان.آ [19]، به نظر می‌رسد که دستگاه‌های ترموالکتریک مبتنی بر این مواد راه را برای توسعه موادی با ضریب کارایی بالا فراهم می‌کنند. به طور سنتی، اثر ترموالکتریک با کمیت‌های رژیم پاسخ خطی یعنی ضرایب سبک¹ و پلتیر² مشخص شده است. پدیده ترموالکتریک غیرخطی، یک حوزه جدیدی از تحقیقات می‌باشد که پیش‌بینی می‌شود بتواند کارایی ترموالکتریک را بهبود بخشد [20-23]. عناصر الکتریکی غیرخطی مانند دیودها، تقویت‌کننده‌ها و ترانزیستورها اجزای کلیدی الکترونیک در قلب تکنولوژی مدرن هستند. اخیراً، تلاش‌های قابل توجهی برای بررسی عناصر فونونی مشابه در نانومواد انجام شده است. با این حال، باید توجه داشت که در بسیاری از موارد، تعامل الکترون‌ها با درجه آزاد اتم (ارتعاشات، فونون‌ها) را نمی‌توان نادیده گرفت. در حالی که اثرات اتلافی الکترون-فونون اغلب عملکرد دستگاه را مختل می‌کند، در اینجا از آنها برای دستیابی به ویژگی‌های غیرخطی ترکیبی استفاده می‌کنیم.

³ Fourier regime

¹ Seebeck coefficient

² Peltier coefficient

$$H_{car} = \sum [\varepsilon_n c_n^+ c_n - V_{n,n+1} (c_n^+ c_{n+1} + c_{n+1}^+ c_n)] \quad 8$$

ε_n انرژی موضعی است و $V_{n,n+1}$ مقدار پرش بین نوکلئوتیدهای نزدیکترین همسایه را تعیین می‌کند. c_n^+ و c_n اپراتورهای خلق و نابودی الکترون در مکان n ام هستند. می‌توان فرض کرد که انتگرال انتقال به فاصله بین دو نود متوالی در زنجیره بستگی دارد. این وابستگی به صورت نمایی (رابطه 9) بیان شده است [28]:

$$V_{n+1,n} = V_0 e^{-\beta_n (y_{n+1} - y_n)} \quad 9$$

β_n تنظیم می‌کند که $(y_{n+1} - y_n)$ با چه شدتی به فاصله جفت بازها بستگی دارد. با بسط $V_{n+1,n}$ و حفظ جمله‌های خطی، به عبارت

$$V_{n+1,n} = V_0 [1 - \beta_n (y_{n+1} - y_n)] \quad 10$$

خواهیم رسید که مورد استفاده قرار گرفته است. علاوه بر این، به منظور بررسی تأثیر برهم کنش بین بار و شبکه، هولستین⁴ پیشنهاد کرد که یک جفت شدگی خطی میان انرژی موضعی بار و جابه‌جایی‌های شبکه به صورت رابطه 11 در نظر گرفته شود [29 و 30].

$$H_{int} = \chi \sum_n y_n c_n^+ c_n \quad 11$$

که در آن χ ثابت جفت‌شدگی بار الکتریکی و شبکه می‌باشد که برابر با $0.3 \text{ eV}/\text{\AA}$ در نظر گرفته می‌شود [31].

سه جزء ذکر شده، هامیلتونی کامل مورد نیاز را برای توصیف انتقال بار و فونون از طریق نانو سیم دی.ان.آ فراهم می‌آورند. این هامیلتونی به نام مدل Peyrard-Bishop-Holestein (PBH) نامیده شده است. ماهیت انتقال بار از طریق دی.ان.آ کوآنتومی می‌باشد، در حالی که ارتعاشات شبکه به صورت کلاسیکی رفتار می‌کنند. به دلیل تفاوت در مقیاس‌های زمانی مربوط به تحوّل بارها و جفت بازها، مدل PBH را می‌توان در توصیف نیمه کلاسیک [29] مورد استفاده قرار داد. از این رو می‌توان برای توصیف تحوّل انتقال بار، از روش

می‌باشد. ضریب تناسب به عنوان ضریب سبیک نامیده می‌شود.

$$J_e = \sigma VT \quad 4$$

هامیلتونی سیستم مورد مطالعه شامل سه بخش می‌باشد: قسمت اول تحوّل شبکه‌های دی.ان.آ را توصیف می‌کند که توسط پیرارد¹، بیشاپ² و داکسویس³ ارائه شده است [24]. مدل PBD در توصیف دقیق پدیده‌های واسرشت سازی و ذوب در دو رشته‌ای دی.ان.آ موفق عمل کرده است [25]. در مدل PBD، دی.ان.آ به عنوان یک نردبان دو رشته‌ای در نظر گرفته شده است. یک پتانسیل غیرهارمونیک

$$W(y_n, y_{n+1}) = \frac{k}{2} (1 + \rho e^{-b(y_n + y_{n+1})}) (y_n - y_{n+1})^2 \quad 5$$

برای توصیف پیوندهای کووالانسی نزدیکترین همسایه در هر رشته مورد استفاده قرار می‌گیرد. همچنین پتانسیل مورس

$$V(y_n) = D_n (e^{-a y_n} - 1)^2 \quad 6$$

برای مدل‌سازی پیوندهای هیدروژن معرفی شده است. بنابراین، هامیلتونی مدل PBD می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

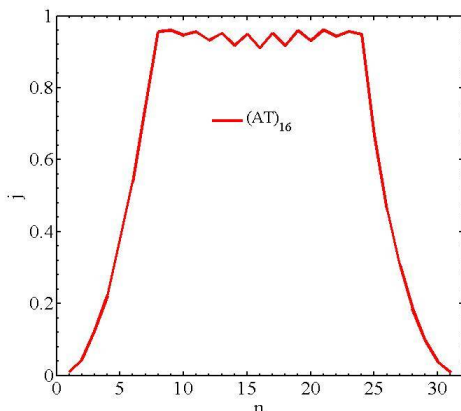
$$H_{lat} = \sum_{n=1}^N \left(\frac{p_n^2}{2m} + V(y_n) + W(y_n, y_{n+1}) \right), \quad 7$$

که در آن، y_n نشان‌دهنده نوسانات جفت بازها از موقعیت تعادل خود می‌باشد و m جرم کاهش یافته جفت بازها را نشان می‌دهد.

قسمت دوم هامیلتونی، انتقال بار را در دو رشته‌ای دی.ان.آ از طریق هامیلتونی تنگ بست [26 و 27] به شرح زیر توصیف می‌کند:

³ Doxois⁴ Holestein¹ Peyrard² Bishop

شده است. جفت‌بازها در دو انتها در تماس با حمام حرارتی در دماهای مختلف T_L و T_R و به ترتیب اختصار کلمات **Left** و **Right** هستند) قرار دارند. ترموستات نوز-هوور¹ برای گرمایش چهار جفت باز اول و آخر استفاده شده است [33]. زمان کافی در نظر گرفته شده است تا سیستم به حالت پایدار برسد. برای رسیدن به حالت پایدار باید با اندازه 10^7 گام زمانی منتظر باشیم [34]. از آنجایی که واحد هر گام زمانی تقریباً برابر با 10 فمتوثانیه می‌باشد [24]، تقریباً با گذشت زمان 100 نانو ثانیه می‌توان مطمئن بود که سیستم به حالت پایدار رسیده است. شکل 2 جریان شار گرما را در طول یک زنجیره همگن $(AT)_{16}$ بعد از 2×10^7 گام زمانی نشان می‌دهد. در ادامه، نتایج ارائه شده بعد از گذشت 10^7 گام زمانی اخذ شده‌اند.



شکل 2. شار گرمای موضعی در طول زنجیره بعد از طی 2×10^7 واحد زمانی.

اکنون می‌توان معادله حرکت را به صورت زیر نوشت:

$$m \frac{d^2 y_n}{dt^2} = -\frac{\partial H}{\partial y_n} - \xi_R \dot{y}_n \delta_{n,r} - \xi_L \dot{y}_n \delta_{n,l} \quad n = 1, \dots, N. \quad 14$$

ξ_L و ξ_R متغیرهای کمکی هستند که عملکرد میکروسکوپی ترموستات را مدل می‌کند:

$$\dot{\xi}_f = \frac{1}{M} [\sum_n m \dot{y}_n - g k_B T_f], \quad f = R, L \quad 15$$

هایزنبرگ استفاده کرد. همچنین معادلات حرکت نیوتن جابه‌جایی جفت باز را معین می‌کنند.

12

$$\begin{cases} m \frac{d^2 y_n}{dt^2} = -\frac{dV(y_n)}{dy_n} - \frac{dW(y_n, y_{n+1})}{dy_n} \\ \quad - \frac{dW(y_n, y_{n-1})}{dy_n} - \chi |c_n|^2 \\ \frac{dc_n}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [c_n, H] \quad n = 1, \dots, N \end{cases}$$

پارامترهای مدل به صورت زیر می‌باشند [26 و 32]:

$$\begin{aligned} D_{AT} &= 0.05 \text{ eV}, & D_{CG} &= 0.075 \text{ eV}, \\ a &= 4.5 \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}, & k &= 0.04 \frac{\text{eV}}{\text{\AA}^2}, & V_0 &= 0.1 \text{ eV}, \\ \epsilon_{AT} &= -4.5 \text{ eV}, & \epsilon_{CG} &= -4.9 \text{ eV}, \\ \beta_{AT} &= 4.5 \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}, & \beta_{CG} &= 6.9 \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}. \end{aligned}$$

با توجه به ماهیت غیر خطی معادلات دیفرانسیل، از آنجایی که حل این معادلات بسیار زمان بر هستند، برای یافتن پاسخ، معادلات را به معادلات دیفرانسیل مرتبه اول

کاهش می‌دهیم. بدین منظور متغیر جدید

$$\dot{y}_n = u_n$$

را معرفی می‌کنیم. با این تبدیل $3N$ تا معادله دیفرانسیلی مرتبه اول جفت شده خواهیم داشت و فضای مطالعه سیستم به فضای فاز تقلیل می‌یابد:

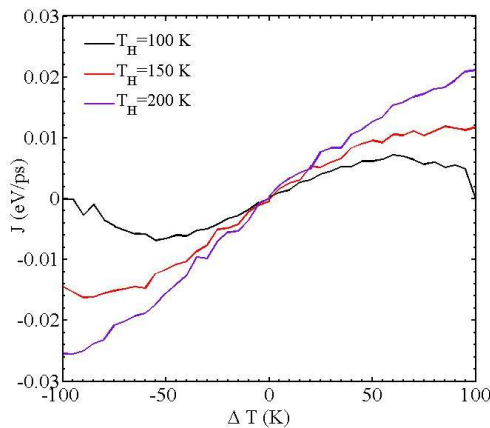
$$\begin{cases} \dot{y}_n = u_n \\ m \dot{u}_n = -\frac{\partial H}{\partial y_n} - \chi |c_n|^2 \\ \dot{c}_n = -\frac{i}{\hbar} [c_n, H] \quad n = 1, \dots, N \end{cases} \quad 13$$

در این فضا برای مطالعه رفتار دینامیکی سیستم، با استفاده از تابع ODE متلب، سری‌های زمانی سیستم تولید می‌شود. در این حالت، موقعیت و سرعت سیستم را در هر لحظه خواهیم داشت و از روی آن شار گرمایی و الکتریکی در طول زنجیره محاسبه می‌گردد.

نتایج

در این مقاله، خواص خارج از تعادل مدل PBD با شبیه‌سازی دینامیک یک زنجیره N ذره‌ای در نظر گرفته

¹ Nose-Hoover



شکل 3. جریان گرما به عنوان تابعی از اختلاف دما، وقوع مقاومت دیفرانسیلی حرارتی منفی.

زنجیره دی.ان.آ در دو انتها به حمام‌های گرمایی با دماهای T_H و T_C (H و C به ترتیب حرف اول کلمات Hot و Cold می‌باشند) وصل می‌شود که H و C نشان‌دهنده ترموستات گرم و سرد هستند. در مرحله اول، دمای ترموستات گرم ثابت نگه‌داشته می‌شود. دمای ترموستات سرد به صورت $T_C = T_H - \Delta T$ تغییر می‌کند. با تغییر T_C در رابطه 15، به تدریج اختلاف دمای دو انتهای تغییر می‌کند.

شکل 2 شار گرمایی را برحسب اختلاف دما نشان می‌دهد. شکل نشان می‌دهد که در دماهای پایین، مقاومت دیفرانسیلی حرارتی منفی (NDTR) در دو جهت متضاد گرادیان دمایی رو به جلو و معکوس رخ می‌دهد. همچنین، با افزایش دما، NDTR ناپدید می‌شود.

علاوه بر اثر ترانزیستور حرارتی مشاهده شده در شکل 3، می‌توان نشان داد که با تغییر دادن دمای حمام فونونی می‌توانیم به‌طور قابل ملاحظه‌ای ویژگی‌های جریان الکتریکی را تغییر دهیم. با این تفاوت که اثر ترانزیستور در اینجا به جای ولتاژ توسط دمای فونون‌ها کنترل می‌شود.

M شدت جفت شدگی بین ترموستات و مولکول را کنترل می‌کند و g درجه آزادی سیستم می‌باشد. انتخاب مقادیر مناسب برای M اهمیت اساسی دارد. این معادلات تحول زمانی ضریب اصطکاک را کنترل می‌کنند، که با انتگرال زمانی اختلاف بین انرژی جنبشی واقعی و متوسط انجام می‌شود. در این رهیافت، علامت ضریب اصطکاک تغییر می‌یابد تا زمانی که انرژی جنبشی واقعی بیش از حد متوسط باشد. پس از آن، ξ سهم مثبتی در معادله حرکت خواهد داشت و جمله نوز-هوور به عنوان اصطکاک عمل می‌کند. در نقطه مقابل، ξ منفی است و نقش نیروی محرک را بازی می‌کند. هنگامی که انرژی جنبشی هر یک از دو انتهای زنجیره برابر با $\frac{1}{2}gk_B T_{L,R}$ باشد، دیگر $\xi_{L,R}$ در زمان تغییر نمی‌کند.

شار گرمایی موضعی مطابق با رابطه

$$j_n = \langle \dot{y}_n \frac{\partial W(y_n, y_{n-1})}{\partial y_n} \rangle \quad 16$$

تعیین می‌شود.

همچنین چگالی جریان موضعی در محل جفت باز n -ام با رابطه زیر [35] تعیین می‌شود:

$$j_n^e = \frac{ieh}{2m_e d^2} [c_n (c_{n+1}^* - c_{n-1}^*) - c_n^* (c_{n+1} - c_{n-1})] \quad 17$$

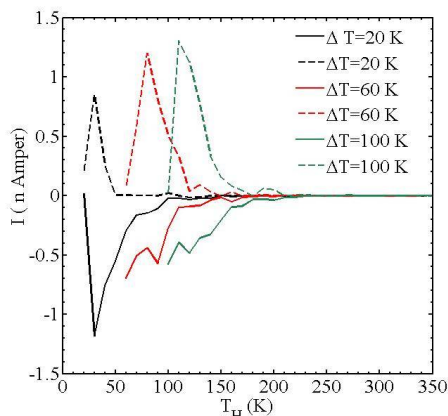
چگالی جریان متوسط در طول زنجیره برابر خواهد بود با

$$J^e = \frac{1}{N} \sum j_n^e. \quad 18$$

مطالعات نشان می‌دهد که برای ظهور جریان‌های نامتقارن، و رخداد مقاومت‌های دیفرانسیلی منفی وجود عدم تقارن در شبکه لازم است [36]. از طرفی اندازه سیستم نقش کلیدی در بروز پدیده‌های غیر خطی بازی می‌کند [37-39]. از اینرو، یک زنجیره نامتقارن متشکل از 32 جفت باز [38] با ترکیب توالی $(AT)_8/(CG)_8$ انتخاب می‌کنیم.

¹ Negative differential thermal resistance

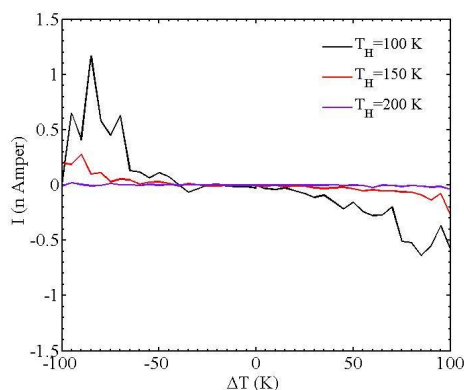
متفاوت است. این نشان‌دهنده این است که دستگاه به‌عنوان یکسوساز ترموالکتریک عمل می‌کند. وقوع یکسوسازی ترموالکتریک و مقاومت دیفرانسیلی ترموالکتریک منفی در چاه کوآنتومی دوگانه [40] و همچنین نانو نوارهای زیگزاگی سیلیسن [39] مشاهده شده است.



شکل 5. جریان الکترونی ناشی از گرما برحسب گرمای چشمه گرم: وقوع یکسوسازی جریان ترموالکتریک.

نتیجه‌گیری

پیدایش رژیم‌های انتقال و مواد جدید، که کارآمدی ترموالکتریک را ارتقاء می‌دهند، فرصت بزرگی برای توسعه استراتژی‌های مدیریت گرما می‌باشند. همچنین مطالعه انتقال جفت شده حرارت و الکتریسیته امکان ظهور پدیده‌های جدیدی را فراهم می‌کند. جریان الکتریکی جهت‌دار ناشی از اختلاف دما، یکی از آثار می‌باشد که در ناحیه انتقال غیرخطی دیده می‌شود. به این اثر، یکسوگی ترموالکتریک گفته می‌شود. همچنین، بروز مقاومت دیفرانسیلی منفی در اثر اختلاف دما، پدیده نوظهوری است که گمان می‌رود کمک شایانی به بهبود کارایی ابزارهای ترموالکتریک نماید. در اینجا، یک ستاپ ساده برای تحقق دیود و ترانزیستور ترموالکتریک مبتنی بر مولکول دی.ان.آ پیشنهاد کردیم.



شکل 4. جریان الکتریکی ایجاد شده توسط گرما: وقوع مقاومت دیفرانسیلی ترموالکتریک منفی

شکل 4 نشان می‌دهد که جریان الکترونیکی قابل ملاحظه‌ای در اثر گرادیان دما در دو جهت رو به جلو و معکوس آشکار می‌شود. در حالتی که دمای ترموستات گرم در 100K ثابت گرفته شده است، مشاهده می‌شود که با کاهش دمای ترموستات سردتر (افزایش اختلاف دما) جریان الکتریکی در طول زنجیره شارش می‌یابد. در جهت رو به جلو، جریان الکتریکی ناشی از گرما به‌طور یکنواخت افزایش می‌یابد تا وقتی که اختلاف دما به 85K می‌رسد. در اختلاف دماهای بیشتر از این حد آستانه، جریان الکتریکی ناشی از گرما کاهش می‌یابد.

این رفتار نشان دهنده وقوع مقاومت دیفرانسیلی ترموالکتریک منفی ($NDTER^1$) در زنجیره دی.ان.آ است. رفتار مشابهی در جهت رو به عقب مشاهده می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش دمای ترموستات گرمتر، ناحیه $NDTER$ ناپدید می‌شود. در ادامه، اختلاف دمای بین ترموستات راست و چپ ثابت نگه داشته می‌شود. سپس، درجه حرارت دو چشمه را به تدریج تغییر می‌دهیم. جریان الکتریکی تولید شده در اثر اختلاف دما برای دو جهت متضاد گرادیان دما نشان داده شده است. از شکل 5 واضح است که شدت جریان ترموالکتریک در دو جهت گرادیان درجه حرارت

¹ Negative differential thermoelectric resistance

coordinated legs, *Science* **324** (2009) 67.

<https://doi.org/10.1126/science.1170336>

[5] A.K. Mazur, M. Maaloum, DNA flexibility on short length scales probed by atomic force microscopy, *Physical Review Letters* **112** (2014) 068104.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.068104>

[6] G.B. Schuster, Long-range charge transfer in DNA I, Springer Science & Business Media (2004).

<https://www.springer.com/gp/book/9783540201311>

[7] R. Di Felice, A. Calzolari, H. Zhang, H. Towards metalated DNA-based structures *Nanotechnology* **15** (2004) 1256.

<https://doi.org/10.1088/0957-4484/15/9/025>

[8] H. Xi, L. Luo, G. Fraisse, Development and applications of solar-based thermoelectric technologies, *Renewable & Sustainable Energy Reviews* **11** (2007) 923.

<https://doi.org/10.1016/j.rser.2005.06.008>

[9] A.M. Omer, Focus on low carbon technologies: The positive solution, *Renewable & Sustainable Energy Reviews* **12** (2008) 2331.

<https://doi.org/10.1016/j.rser.2007.04.015>

[10] O. Afshar, R. Saidur, M. Hasanuzzaman, M. Jameel, A review of thermodynamics and heat transfer in solar refrigeration system, *Renewable &*

خواص فوق‌العاده‌ی دی.ان.آ باعث جلب شدن توجهات جدیدی به سمت نانو دستگاه‌های مبتنی بر دی.ان.آ شده است. شبیه‌سازی‌های عددی با استفاده از پارامترهای واقعی رخداد یکسوسازی گرما و یکسوسازی ترموالکتریک را نشان می‌دهد. علاوه‌براین، این عملکردها، می‌تواند مدیریت هوشمند انتقال گرما و بار را در نانو سیستم‌ها را قادر سازد که عنصر اساسی در تکنولوژی‌های پردازش اطلاعات آینده می‌باشد. بروز اثرات غیرخطی جدید هنگام جفت شدگی جریان بار و گرما، چارچوب و فرصت‌های جدیدی را در راه توسعه فناوری‌های نانو با کارایی انرژی بالا فراهم می‌آورد.

مرجع‌ها

[1] J. Chen, S.A. Darst, D. Thirumalai, Promoter melting triggered by bacterial RNA polymerase occurs in three steps, *Proceedings of the National Academy of Sciences U.S.A.* **107** (2010) 12523.

<https://doi.org/10.1073/pnas.1003533107>

[2] A. Bruce, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, P. Walter, Molecular Biology of the Cell, ed. Garland Science, New York, (2008).

<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK21054/>

[3] H.S. Nalwa, Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology **7**, American Scientific Publishers, (2004).

<http://www.aspbs.com/enn15.html>

[4] T. Omabegho, R. Sha, N.C. Seeman, A bipedal DNA Brownian motor with

- Materials* **25** (2013) 2911.
<https://doi.org/10.1021/cm400893e>
- [17] S.K. Yee, S. LeBlanc, K.E. Goodson, C. Dames, per W metrics for thermoelectric power generation: beyond ZT, *Energy & Environmental Science* **6** (2013) 2561.
<https://doi.org/10.1039/C3EE41504J>
- [18] S. LeBlanc, S.K. Yee, M.L. Scullin, C. Dames, K.E. Goodson, Material and manufacturing cost considerations for thermoelectrics, *Renewable & Sustainable Energy Reviews* **32** (2014) 313.
<https://doi.org/10.1016/j.rser.2013.12.030>
- [19] S. Behnia, R. Panahinia, Ballistic induced pumping of hypersonic heat current in DNA nano wire, *The European Physical Journal B* **89**.12 (2016) 263.
<https://doi.org/10.1140/epjb/e2016-70490-x>
- [20] D. Vashaee A. Shakouri, Improved thermoelectric power factor in metal-based superlattices, *Physical Review Letters* **92** (2004) 106103.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.106103>
- [21] M. Zebarjadi, K. Esfarjani, A. Shakouri, Nonlinear Peltier effect in semiconductors, *Applied Physics Letters* **91** (2007) 122104.
<https://doi.org/10.1063/1.2785154>
- [22] J. Meair P. Jacquod, Scattering theory of nonlinear thermoelectricity in quantum coherent conductors, *Journal of Physics: Condensed Matter* **25** (2013) 082201.
- Sustainable Energy Reviews* **16** (2012) 5639.
<https://doi.org/10.1016/j.rser.2012.05.016>
- [11] M. Thirugnanasambandam, S. Iniyar, R. Goic, A review of solar thermal technologies, *Renewable & Sustainable Energy Reviews* **14** (2010) 312.
<https://doi.org/10.1016/j.rser.2009.07.014>
- [12] D.M. Rowe, Thermoelectrics, an environmentally-friendly source of electrical power, *Renewable Energy* **16** (1999) 1251. [https://doi.org/10.1016/S0960-1481\(98\)00512-6](https://doi.org/10.1016/S0960-1481(98)00512-6)
- [13] C. Wood, Reports on Progress in Physics **51** (1988) 459–539.
<https://doi.org/10.1088/0034-4885/51/4/001>
- [14] Y. Gelbstein, Z. Dashevsky, M.P. Dariel, High performance n-type PbTe-based materials for thermoelectric applications, *Physica B: Condensed Matter* **363** (2005) 196–205.
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2005.03.022>
- [15] G.J. Snyder, E.S. Toberer, Complex thermoelectric materials, *Nature Materials* **7** (2008) 105–114.
https://doi.org/10.1142/9789814317665_0016
- [16] M.W. Gaultois, T.D. Sparks, C.K.H. Borg, R. Seshadri, W.D. Bonificio, D.R. Clarke, Data-driven review of thermoelectric materials: performance and resource considerations, *Chemistry of*

- [28] G. Kalosakas, S. Aubry, G.P. Tsironis, Polaron solutions and normal-mode analysis in the semiclassical Holstein model, *Physical Review B* **58** (1998) 3094. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.3094>
- [29] T. Holstein, Studies of polaron motion: Part I. The molecular-crystal model, *Annals of Physics* **8** (1959) 325. [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(59\)90002-8](https://doi.org/10.1016/0003-4916(59)90002-8)
- [30] D. Hennig, C. Neissner, M.G. Velarde, W. Ebeling, Effect of anharmonicity on charge transport in hydrogen-bonded systems, *Physical Review B* **73** (2006) 024306. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.024306>
- [31] D. Hennig, Electron-vibron-breather interaction, *Physical Review E* **62** (2000) 2846. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.62.2846>
- [32] L. Hawke, G. Kalosakas, C. Simserides, Electronic parameters for charge transfer along DNA, *The European Physical Journal E* **32** (2010) 291. <https://doi.org/10.1140/epje/i2010-10650-y>
- [33] S. Nosé. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods, *The Journal of chemical physics* **81** (1984) 511. W.G. Hoover, *Physical Review A* **31** (1985) 1695. <https://doi.org/10.1063/1.447334>
- [23] M. Leijnse, M.R. Wegewijs, K. Flensberg, Nonlinear thermoelectric properties of molecular junctions with vibrational coupling, *Physical Review B* **82** (2010) 045412. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.045412>
- [24] T. Dauxois, M. Peyrard, A.R. Bishop, Dynamics and thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation, *Physical Review E* **47** (1993) R44. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.47.684>
- [25] S.S. Alexandre, E. Artacho, J.M. Soler, H. Chacham, Small polarons in dry DNA, *Physical Review Letters* **91** (2003) 108105. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.108105>
- [26] S. Komineas, G. Kalosakas, A.R. Bishop, Effects of intrinsic base-pair fluctuations on charge transport in DNA, *Physical Review E* **65** (2002) 061905. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.65.061905>
- [27] J. Zhu, K.Ø. Rasmussen, A.V. Balatsky, A.R. Bishop, Local electronic structure in the Peyrard–Bishop–Holstein model, *Journal of Physics: Condensed Matter* **19** (2007) 136203. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/19/13/136203>

- [38] S. Behnia, R. Panahinia. R. Designing thermal diode and heat pump based on DNA nanowire: Multifractal approach, *Physics Letters A* **381** (2017) 2077-2084. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2017.02.044>
- [39] H.H. Fu, D.D. Wu, Z.Q. Zhang, L. Gu, Spin-dependent Seebeck effect, thermal colossal magnetoresistance and negative differential thermoelectric resistance in zigzag silicene nanoribbon heterojunction, *Scientific reports* **5** (2015) 10547. <https://doi.org/10.1038/srep10547>
- [40] J.H. Jiang, M. Kulkarni, D. Segal, Y. Imry, Phonon thermoelectric transistors and rectifiers, *Physical Review B* **92** 4 (2015) 045309. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.045309>
- [34] B. Li, H. Zhao, B. Hu, Can disorder induce a finite thermal conductivity in 1D lattices? *Physical review letters* **86**.1 (2001) 63. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.63>
- [35] P. Maniadis, G. Kalosakas, K.Ø Rasmussen, A.R. Bishop, ac conductivity in a DNA charge transport model, *Physical Review E* **72** (2005) 021912. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.72.021912>
- [36] B. Hu, L. Yang, Y. Zhang, Asymmetric heat conduction in nonlinear lattices *Physical review letters* **97** 12 (2006) 124302. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.124302>
- [37] Z.G. Shao, L. Yang, H.K. Chan, B. Hu, Transition from the exhibition to the nonexhibition of negative differential thermal resistance in the two-segment Frenkel-Kontorova model, *Physical Review E* **79** 6 (2009) 061119. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.79.061119>