

# Design of biological detector based on human chromosome

**Sohrab Behnia\*, Samira Fathizadeh, Fatemeh Nemati**

Department of Physics, Faculty of science and new technologies, Urmia University of Technology,  
Urmia, Iran

Received: 07.12.2022    Final revised: 09.06.2022    Accepted: 23.09.2024

Doi: [10.22055/jrmbms.2024.19513](https://doi.org/10.22055/jrmbms.2024.19513)

## Abstract

This study investigated biosensors based on the human chromosome (CH22 sequence). The results showed that the electronic and spin transfer of the CH22 sequence is strongly dependent on the frequency and amplitude of incident light and mechanical stress. Accordingly, within the specified frequency domain of 4 to 5 terahertz (THz), the system demonstrates the CH22 capability to transfer the maximum electric current. Furthermore, upon the application of longitudinal stress quantified strain which is denoted by ( $S_1=4$ ), it is observed that the system facilitates the transmission of the maximal spin current. Furthermore, this study showed the emergence of a region of negative differential resistance in response to bias voltage changes, a phenomenon that does not occur in the absence of incident light and DNA tilt, even when mechanical stress is applied. Also, the results showed that positive mechanical stress has a better effect on the formation of spin flow than negative stress. Medical diagnostic tools based on spin polarization have a special place in medicine. By accurately controlling the parameters affecting electrical and spin transport, these sensors can detect biomolecular changes with high sensitivity in biological environments, which can create a fundamental change in the design of modern medical monitoring systems.

**Keywords:** Biological materials, Biological detector, Optoelectronics, Spintronics, Piezospintronics

---

\* Corresponding Author: [s.behnia@sci.uut.ac.ir](mailto:s.behnia@sci.uut.ac.ir)

## طراحی آشکارساز زیستی بر مبنای کروموزوم انسانی

سهراب بهنیا\*، سمیرا فتحی‌زاده، فاطمه نعمتی

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

دریافت: ۱۴۰۱/۰۹/۱۶ ویرایش نهایی: ۱۴۰۳/۰۳/۲۰ پذیرش: ۱۴۰۳/۰۷/۰۲

Doi: [10.22055/jrmb.2024.19513](https://doi.org/10.22055/jrmb.2024.19513)

### چکیده

ما حسگرهای زیستی را بر اساس کروموزوم انسانی (توالی CH22) بررسی کردیم. نتایج نشان می‌دهد که انتقال الکترونیکی و اسپینی توالی CH22 به شدت به فرکانس و دامنه نور فرودی و تنش مکانیکی وابسته است. بر این اساس، در محدوده فرکانس مشخص شده از ۴ به ۵ تراهرتز (THz)، این سیستم قابلیت CH22 را برای انتقال حداکثر جریان الکتریکی نشان می‌دهد. علاوه بر این، با اعمال تنش طولی که با  $S_1 = 4$  نشان داده می‌شود، مشاهده می‌گردد که سیستم انتقال حداکثر جریان اسپین را تسهیل می‌کند. علاوه بر این، این مطالعه ظهور ناحیه‌ای با مقاومت دیفرانسیل منفی را در پاسخ به تغییرات ولتاژ بایاس نشان می‌دهد، پدیده‌ای که در غیاب نور فرودی و شیب DNA، حتی زمانی که تنش مکانیکی اعمال می‌شود، رخ نمی‌دهد. همچنین نتایج نشان داد که تنش مکانیکی مثبت نسبت به تنش منفی تأثیر بهتری بر تشکیل جریان اسپین دارد. ابزارهای تشخیص پزشکی مبتنی بر پلاریزاسیون اسپین جایگاه ویژه‌ای در پزشکی دارند. این حسگرها با کنترل دقیق پارامترهای مؤثر بر حمل و نقل الکتریکی و اسپین می‌توانند تغییرات بیومولکولی را با حساسیت بالا در محیط‌های بیولوژیکی تشخیص دهند که می‌تواند تغییر اساسی در طراحی سیستم‌های نظارت پزشکی مدرن ایجاد کند.

**کلیدواژگان:** مواد زیستی، آشکارساز زیستی، اپتوالکترونیک، اسپیترونیک، پیرواسپیترونیک

### مقدمه

الکترونیک سنتی عمل می‌کند. این فناوری با ارائه مقیاس‌پذیری برتر، کاهش مصرف انرژی و افزایش سرعت پردازش داده‌ها، قابلیت‌های دستگاه‌های نیمه‌هادی را بهبود می‌بخشد و عملکردهای ذخیره‌سازی، سنجش و محاسبات را در یک معماری یکپارچه ادغام می‌کند. پیشرفت‌هایی مانند اثر پیرو اسپیترونیک، که جریان‌های اسپین را از طریق تنش مکانیکی تنظیم می‌کند، نیز مورد توجه است، اما محدودیت‌هایی نظیر هزینه‌های بالای تولید و شکنندگی مواد معدنی مطرح است. در نتیجه، ساختارهای بیولوژیکی مانند DNA به دلیل فراوانی و

در سال‌های اخیر، با نزدیک شدن فناوری مبتنی بر سیلیکون به محدودیت‌های فنی و فیزیکی خود، دستگاه‌های الکترونیکی مولکولی با قابلیت تنظیم مجدد نسبت به محرک‌های بیرونی (مانند نور، گرما و تنش) به‌عنوان یکی از امیدوارکننده‌ترین نامزدها برای دستگاه‌های الکترونیکی آینده (سوئیچینگ معکوس، آشکارسازهای زیستی، مانیتورهای محیطی) در نظر گرفته شده‌اند. اسپیترونیک [۱]، که به‌عنوان علم انتقال اطلاعات بدون بار شناخته می‌شود، به‌عنوان مکمل یا جایگزینی برای

\* نویسنده مسئول: [behnia@sci.uut.ac.ir](mailto:behnia@sci.uut.ac.ir)



تطبیق پذیری ساختاری، به عنوان جایگزین های مطلوب مورد بررسی قرار گرفته اند [۲].

زمینه روبرو رشد در حیطه اسپیترونیک مولکولی، کاپرو اسپیترونیک اثر (CISS<sup>1</sup>) نامیده می شود که از DNA دو رشته ای برای تولید و کنترل جریان های اسپینی استفاده می کند [۳]. این فناوری می تواند در محدوده ترهتر برای فیلترینگ اسپین [۴]، حسگرهای تشخیص سرطان [۵] و ترکیب DNA با نقاط کوآتومی [۶]، به منظور ایجاد اثرات فتولتائیک به کار رود.

از طرفی با توجه قابلیت DNA به عنوان یک دی الکتریک شفاف در طیف مرئی، می توان کاربرد حسگرهای نوری مبتنی بر DNA را به غربالگری داروها [۷]، ایمنی و کیفیت مواد غذایی [۸]، تشخیص جهش های ژنتیکی [۹] و عوامل بیماری زا [۹] و غیره دسته بندی کرد. در سال ۲۰۰۴، لی و همکاران، سوئیچینگ هدایت الکتریکی مولکول های فتوکرومیک را به صورت نظری بررسی کردند و دینامیک نوری تغییرات اوربیتال های مولکولی را شبیه سازی نمودند [۱۰]. سوئیچ های مولکولی از جمله سوئیچ های نوری مبتنی بر DNA و سوئیچ های کایرال حساس به نور مرئی توسط وانگ و همکاران در سال ۲۰۱۹ معرفی شد [۱۱]. با توجه به دانش ما، تاکنون دستگاه پیزو اسپیترونیک ناشی از تنش بر اساس توالی DNA طراحی نشده است.

در این مطالعه، کروموزوم CH22 [۱۲] به دلیل چشم انداز ژنتیکی غنی (نشانگر ژنتیکی) و ارتباط مستقیم با بیماری های مادرزادی قلبی، اسکیزوفرنی و سرطان به عنوان نقطه کانونی انتخاب شد. با توجه به نیاز مبرم به روش های غیرتهاجمی و تشخیص زودهنگام، توسعه حسگرهای نوری و تنشی که این کروموزوم را هدف قرار می دهند، راه امیدوارکننده ای

برای نظارت بر سلامت عصبی و ایمونولوژیک ارائه می کند.

از جمله مدل های مطرح در زمینه مدل سازی نظری دینامیک DNA، می توان به مدل پیارد-بیشاپ-داکسیوس<sup>۲</sup>، مدل پیارد-بیشاپ هولشتاین [۱۳] اشاره کرد. ما از یک هامیلتونی نیمه کلاسیک ترکیبی برای مدل سازی تابش نور و انتقال بار استفاده می کنیم. در ادامه، خواص پیزو اسپیترونیک زنجیره DNA را به عنوان یک سیستم مولکولی مطالعه می نماییم. مطالعه حاضر به چند بخش تقسیم می شود، در بخش مدل و روش، در دو قسمت به توصیف مدل سازی ریاضی آشکارساز نوری و آشکارساز تنش پرداخته می شود. سپس با تقسیم بخش بحث و نتیجه گیری به دو قسمت مجزا برای نتایج آشکارساز نوری و تنش، به بحث پیرامون نتایج پرداخته و نهایتاً در بخش جمع بندی، مطالب بحث شده را به صورت خلاصه بیان می کنیم.

### مدل و روش

در مطالعه حاضر، بخش مدل و روش، به دو زیربخش اساسی که شامل مدل سازی آشکارساز نوری و آشکارساز تنش با در نظر گرفتن توالی DNA متصل به الکترودهای فلزی تماس یافته با منبع جریان تقسیم می شود (شماتیک مسأله در شکل ۱ نشان داده شده است). یک مولکول DNA از دو زنجیره پلی نوکلئوتیدی طولانی تشکیل شده است که از چهار نوع زیر واحد نوکلئوتیدی تشکیل شده است. هر یک از این زنجیره ها به عنوان یک زنجیره DNA یا یک رشته DNA شناخته می شود. در مورد نوکلئوتیدهای موجود در DNA، قند دئوکسی ریبوز است که به یک گروه فسفات متصل است (از این رو اسید دئوکسی ریبونوکلئیک نامیده می شود) و پایه ممکن است آدنین

<sup>2</sup> Peyrard-Bishop-Dauxois

<sup>1</sup> Chiral-Induced Spin Selectivity

پتانسیل مورس هستند. همچنین  $k$  ثابت جفت شدگی، پارامتر سفتی و  $b$  ضریب میرایی در عبارت انباشتگی است.

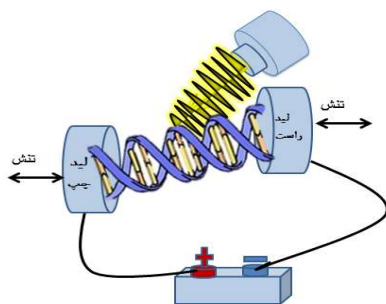
به منظور مدل کردن ساختار الکترونیکی، از مدل نردبانی استفاده می‌شود که تحت معادله ۳ معرفی می‌شود [۱۷]:

$$H_{CL} = \sum_{n,j=1,2} \varepsilon_{n,j} (c'_{n,j} c_{n,j}) - t_{\parallel} \sum_{n,j=1,2} (c'_{n,j} c_{n+1,j} + H.c.) - \quad 3$$

$$t_{\perp} \sum_{n,j=1,2} e^{-\beta y_n} (c'_{n,j} c_{n,2} + H.c.) + V_{\parallel} \sum_{n,j=1,2} c_{n,j} c_{n+1,j} +$$

$$V_{\perp} \sum_n e^{-\lambda y_n} n_{n,1} n_{n,2} + \frac{U}{4} \sum_{n,j=1,2} n_{n,j}^2$$

در این معادله،  $\varepsilon_{n,j}$  بیانگر انرژی جایگاهی الکترون باز  $n$ م از رشته  $j$ ام است.  $t_{\parallel}$  و  $t_{\perp}$  به ترتیب بیانگر انرژی پرش درون رشته‌ای و بین رشته‌ای است.  $U$  معرف برهم‌کنش کلمبی در رشته،  $V_{\parallel}$  و  $V_{\perp}$  نیز به ترتیب نشان‌دهنده برهم‌کنش کولمبی بین پایه‌های مجاور و مکمل هستند.  $c$  و  $c'$  معرف عملگرهای خلق و نابودی می‌باشند. مقادیر عددی مربوط به پارامترهای معادله ۳، در جدول ۱ آورده شده است.



شکل ۱. نمای طرح‌واره مساله

همایلتونی الکترون به فرم زیر نوشته می‌شود [۱۸]:

$$H_{Lead} = \sum_{k,j=1,2} \left( \varepsilon_{L_{k,j}} + \frac{eV_b}{2} \right) a'_{L_{k,j}} a_{L_{k,j}} + \quad 4$$

$$\sum_{k,j=1,2} \left( \varepsilon_{R_{k,j}} - \frac{eV_b}{2} \right) a'_{R_{k,j}} a_{R_{k,j}}$$

در رابطه فوق،  $a'$  و  $a$  به ترتیب عملگرهای خلق و نابودی الکترون در الکترون هستند و  $\varepsilon_{\beta_{k,j}}$  به‌ازای

(A)، سیتوزین (C)، گوانین (G) یا تیمین باشد [۱۴،۱۵].

توالی CH22 با تعداد ۴۰ جفت باز (AGGGCATCGCTAACGAGGTCGCCGT) انتخاب شد. (CCACAGCATCGCTAT)

نحوه بررسی شامل توجه به تغییرات جریان نسبت به اعمال نور فرودی و تنش می‌باشد. بدین منظور ابتدا معادلات همایلتونی الی ۶، جهت مدل‌سازی آشکارساز نوری و معادلات ۷ الی ۱۰، جریان مربوطه ارائه می‌شود. در ادامه، مدل‌سازی همایلتونی و جریان حاصل از تنش طبق معادلات ۱۱ الی ۱۴ معرفی می‌شود.

### مدل‌سازی آشکارساز نوری

مدل‌سازی ریاضی آشکارساز نوری از طریق معادله زیر انجام می‌گردد:

$$H = H_{PBD} + H_{CL} + H_{Lead} + H_{Lead-DNA} \quad 1$$

$$+ H_{ph} + H_{so}$$

که در آن  $H_{PBD}$  [۱۶] یک همایلتونی کلاسیک برای توصیف کشش جفت‌بازها با توجه به شرایط تعادل بر اساس مدل PBD است.

$$H_{PBD} = \sum_n \left[ \frac{p_n^2}{2m} + D_n (e^{a_n y_n} - 1)^2 + \frac{k}{2} (1 + \rho e^{-(y_{n+1} + y_n)}) (y_{n+1} - y_n)^2 \right] \quad 2$$

معادله ۲ از سه جمله تشکیل شده است: انرژی جنبشی که در آن  $p_n$  نشان‌دهنده تکانه مزدوج  $y_n$  می‌باشد. جمله دوم و سوم به ترتیب، پتانسیل مورس برای مدل‌سازی انرژی برهم‌کنش مؤثر پایه‌های مکمل همراه با پیوند هیدروژنی و برهم‌کنش انباشته ناهارمونیک است. در اینجا  $\frac{1}{a_n}$  و  $D_n$  به ترتیب عرض و عمق

رانگ-کوتا، معادلات به دست آمده حل گردیده و جریان الکتریکی و اسپینی محاسبه می شود.

$$\begin{aligned} \dot{y}_n = & \frac{2a_n D_n}{m} e^{-a_n y_n} (e^{-a_n y_n} - 1) + \frac{kb\rho}{2m} [e^{-h(y_n+y_{n+1})} (y_n - y_{n-1}) \\ & + e^{-h(y_{n+1}-y_n)} (y_{n+1} - y_n)^2] - \frac{k}{m} [(1 + \rho e^{-h(y_n+y_{n+1})}) (y_n - y_{n-1}) \\ & - [(1 + \rho e^{-h(y_n+y_{n+1})}) (y_{n+1} - y_n)] - \frac{2pt_\perp}{m} e^{py_n} \langle c_{n,1}^\dagger c_{n,2} \rangle \\ & + \frac{V_\perp}{m} \chi e^{(-\chi y_n)} \left\langle n_{n,1} n_{n,2} - \frac{\langle c_{n,1}^\dagger c_{n,2} \rangle^2}{2} \right\rangle \end{aligned} \quad \vee$$

$$\begin{aligned} \dot{c}_{n,j} = & \frac{-i}{\hbar} [\varepsilon_{n,j} c_{n,j} - t_{\parallel} (c_{n+1,j} + c_{n-1,j}) - t_{\perp} e^{-py_n} (c_{n,1} + c_{n,2}) \\ & + V_{\parallel} c_{n,j} (c_{n+1,j} + c_{n-1,j}) + V_{\perp} e^{-\chi y_n} (c_{n,1} n_{n,2} + n_{n,1} c_{n,2}) \\ & + \frac{U}{4} (n_{n,j} c_{n,j} + c_{n,j} n_{n,j}) \\ & + \sum_k (\delta_{n,1} t_L a_{L,k,j} + \delta_{n,N} t_R a_{R,k,j}) \end{aligned} \quad \wedge$$

$$\begin{aligned} \dot{a}_{L,k,j} = & \frac{-i}{\hbar} \left( \varepsilon_{L,j,k} + \frac{eV_b}{2} \right) + t_L c_{1,j} \\ \dot{a}_{R,k,j} = & \frac{-i}{\hbar} \left( \varepsilon_{R,j,k} + \frac{eV_b}{2} \right) + t_R c_{N,j} \end{aligned} \quad 9$$

لذا معادله جریان الکتریکی از طریق اعمال تأثیر فوتون به صورت معادله ۷ بیان می گردد:

$$\begin{aligned} I_{n,j} - I_{n-1,j} = & \frac{-ie}{\hbar} [n_{n,j}, H] \\ I_e = & \frac{ie}{\hbar} \sum_{n,j=1,2} [t_{\parallel} \exp\left(\frac{ier_0}{\hbar c} A(t)\right) (c_{n+1,j}^\dagger c_{n,j} - c_{n-1,j}^\dagger c_{n,j}) \\ & + t_{\perp} \exp(-py_n) (c_{n,2}^\dagger c_{n,1} - c_{n,1}^\dagger c_{n,2}) + \\ & \sum_k t_L (c_{1,j}^\dagger a_{L,k,j} - a_{L,k,j}^\dagger c_{1,j}) + t_R (a_{R,k,j}^\dagger c_{N,j} - c_{N,j}^\dagger a_{R,k,j}) \end{aligned} \quad 10$$

### مدل سازی آشکارساز تنش

با در نظر گرفتن هامیلتونین برهم کنش اسپین-مدار از طریق معادله ۱۱، امکان بررسی جریان اسپینی فراهم می شود [۱۹]:

$\beta = (L, R)$  معرف انرژی جایگاهی الکترون در سایت های مربوط به الکتروستات هستند.  $V_b$  معرف ولتاژ اعمالی از طریق الکتروستات می باشد.

$$H_{Lead-DNA} = \sum_{k,j=1,2} (t_L a_{L,k,j}^\dagger c_{1,j} + t_R a_{R,k,j}^\dagger) \quad 5$$

در رابطه ۵ که معرف اندرکنش بین الکتروستات و توالی DNA است [۱۸]،  $t_\beta$  بیانگر ثابت پرش الکترون بین الکتروستات و توالی DNA است. تابش نور بر روی زنجیره DNA را می توان از طریق یک فاز پیرلز<sup>۱</sup> اضافه شده در عبارت پرش درون رشته ای شبیه سازی کرد. بنابراین، برهم کنش الکترون-فوتون به صورت زیر بیان می شود [۱۷]:

$$H_{ph} = -t_{\parallel} \sum_{n,j} \left[ \exp\left(\frac{ier_0}{\hbar c} A(t)\right) c_{n,j}^\dagger c_{n+1,j} + H.c. \right] \quad 6$$

که  $c$  و  $e, r_0$  به ترتیب فاصله ثابت بین جفت بازهای مجاور در امتداد رشته، بار الکترون و سرعت نور هستند. در رابطه ۶، عبارت:

$$A(t) = A_0 \cos(\omega t) \exp\left(\frac{-(t-t_c)^2}{2\tau^2}\right)$$

معرف پتانسیل برداری است، که در آن  $A_0$ ،  $\omega$ ،  $t_c$  و  $\tau$  به ترتیب بیانگر دامنه، فرکانس، مرکز و نصف عرض پالس نور تابشی هستند.

به منظور بررسی رفتار دینامیکی سیستم، از معادلات هامیلتونی مشخص کننده جفت بازها استفاده می شود (

$$\dot{p}_n = -\frac{\partial H}{\partial q_n}$$

که جایی که  $p_n$  تکانه تعمیم یافته و

$q_n$  مختصات تعمیم یافته است. معادلات تحول مشتق شده از هامیلتونی سیستم به فرم زیر استخراج می شوند و در گام آخر، از طریق نرم افزار متلب و از طریق روش

<sup>1</sup> Pierz phase

### بحث و نتیجه‌گیری

توجه به مطالعه نظری از اهمیت به‌سزایی برخوردار است. در این پژوهش، سعی می‌شود پارامترهای کنترل برای مشاهده پاسخ الکتریکی قابل توجه در DNA مورد بررسی قرار بگیرد.

### نتایج مربوط به آشکارساز نوری

در ابتدا، ما به‌طور هم‌زمان دامنه و فرکانس نور را برای مطالعه شدت جریان الکتریکی عبوری از توالی CH22 تغییر می‌دهیم (شکل ۲). همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، جزایری رنگی در سطح پارامترهای مؤثر روی جریان الکتریکی آشکار می‌شود (رنگ قرمز معرف ماکزیمم مقدار جریان الکتریکی و رنگ آبی معرف مینیمم مقدار جریان الکتریکی می‌باشد). در محدوده‌های آبی‌رنگ، جریان معکوس از سیستم عبور می‌کند و در محدوده‌های با رنگ نیلی جریان به صفر میل می‌کند و در محدوده قرمز رنگ، جریان الکتریکی به بیشترین مقدار خود می‌رسد. لذا محدوده‌های مؤثر در فرکانس تابش فرودی مشخص می‌شود. همان‌طور که در شکل ۲ مشخص است، در محدوده فرکانس ۴-۵ (THz)، بیشترین جریان الکتریکی از سیستم عبور می‌کند. نتایج به‌دست آمده علاوه بر اینکه بیانگر این واقعیت است که سویچ الکتریکی DNA به‌صورت بالقوه‌ای به‌قدرت میدان الکتریکی نور فرودی وابسته است [۲۱]، می‌تواند یک الگوی مدل برای تشخیص تابش تراهرتز بر پایه مواد زیستی را پیشنهاد دهد. به‌عبارتی، این نشان می‌دهد که سوئیچینگ کنترل شده DNA بین الکتروادهای فلزی،

$$H_{So} = \sum_n 2it_{so} \cos \theta \left( c_n^{\uparrow} c_{n+1}^{\uparrow} - c_n^{\downarrow} c_{n+1}^{\downarrow} + \right. \\ \left. D_{n,n+1} c_n^{\uparrow} c_{n+1}^{\downarrow} - D_{n,n+1}^* c_n^{\downarrow} c_{n+1}^{\uparrow} - D_{n,n-1}^* c_n^{\downarrow} c_{n-1}^{\uparrow} - D_{n-1,n} c_n^{\uparrow} c_{n-1}^{\downarrow} \right) \quad 11$$

که در آن

$$D_{n,n+1} = it_{so} \sin \theta \left\{ \begin{aligned} & \sin [n\Delta\phi] + \sin [n+1(\Delta\phi)] + \\ & i \cos [n\Delta\phi] + i \cos [n+1(\Delta\phi)] \end{aligned} \right\} \quad 12$$

$t_{so}$  ثابت برهم‌کنش اسپین-مدار است.  $\theta$  زاویه مارپیچ DNA و  $\phi$  زاویه پیچش است.

اعمال تنش مکانیکی، از طریق تصحیح انرژی جایگاهی و انرژی پرش الکترون صورت می‌گیرد [۲۰]:

$$\varepsilon' = \varepsilon + \frac{1}{2} e \frac{r'}{L'} \tan \alpha V_{sd} \cos \left( \frac{2n\pi}{10} + \phi_0 \right) \\ r' = -t \exp \left[ - \left( 1 + \frac{S_1}{10} \right) \right] \quad 13$$

که در روابط ۱۳  $r' = r \left( 1 - \sigma \frac{S_1}{100} \right)$  و

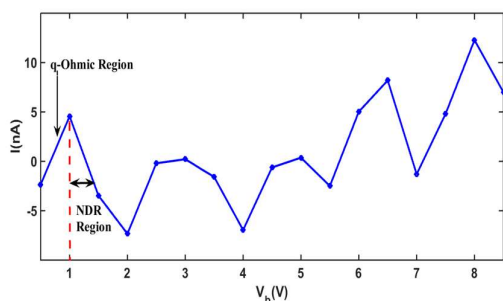
$L' = L \left( 1 + \frac{S_1}{100} \right)$  می‌باشد، که به‌ترتیب بیانگر شعاع و طول تعمیم یافته DNA نسبت به‌عامل تنش مکانیکی ( $S_1$ ) است. لذا جریان اسپینی از طریق اعمال تنش به‌صورت معادلات ۱۴ به‌دست می‌آیند:

$$I^{\uparrow} = \frac{-ie}{\hbar} \sum_n \left\{ \begin{aligned} & w_{n,n+1} c_n^{\uparrow} c_{n+1}^{\uparrow} + w_{n-1,n}^* c_{n-1}^{\uparrow} c_n^{\uparrow} \\ & + D_{n,n+1} c_n^{\uparrow} c_{n+1}^{\downarrow} - D_{n-1,n} c_{n-1}^{\uparrow} c_n^{\downarrow} \end{aligned} \right\} \\ I^{\downarrow} = \frac{-ie}{\hbar} \sum_n \left\{ \begin{aligned} & w_{n,n+1}^* c_n^{\downarrow} c_{n+1}^{\downarrow} + w_{n-1,n} c_{n-1}^{\downarrow} c_n^{\downarrow} \\ & + D_{n,n+1}^* c_n^{\downarrow} c_{n+1}^{\uparrow} - D_{n-1,n}^* c_{n-1}^{\downarrow} c_n^{\uparrow} \end{aligned} \right\} \quad 14$$

در نهایت با به‌دست آوردن  $I_s = I^{\downarrow} - I^{\uparrow}$ ، جریان اسپینی خالص محاسبه می‌شود.

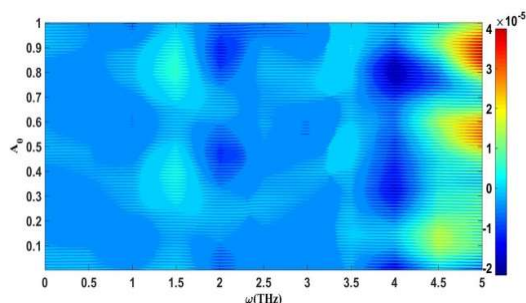
به‌عنوان یک روش جدید، بدون برچسب و به‌دلیل تطبیق پذیری آن، روش برجسته‌ای است که برای اهداف زیست‌حسی به‌کار می‌رود. در اصل، کاربرد آن به سنجش DNA محدود نمی‌شود، بلکه شامل انواع مولکول‌های زیستی می‌شود، که با اتصال خاص به لایه پروب پیوند شده، دینامیک سوئیچینگ آن را تغییر می‌دهند.

۰٫۵-۸٫۵ ولت تغییر داده می‌شود تا سوئیچینگ تعدیل شود. نتیجه برای توالی CH22 به‌عنوان یک نمودار مشخصه I-V ارائه شده است (شکل ۳). با افزایش ولتاژ تا ۱ ولت، می‌توان یک افزایش شبه‌اهمی در جریان شارژ تا ۳ نانو آمپر مشاهده کرد، اما افزایش بیشتر ولتاژ منجر به کاهش جریان الکتریکی می‌شود، که در تطابق با یافته‌های ژوان<sup>۱</sup> و همکاران می‌باشد [۲۳]. این پدیده را می‌توان به‌عنوان پدیده مقاومت دیفرانسیلی منفی توضیح داد. پدیده NDR قبلاً در مطالعه رفتار سوئیچینگ مولکول‌ها در طراحی سنسورها مشاهده شده است [۲۴]. با مطالعه شکل ۳، مشخص می‌شود جریان بار، با افزایش ولتاژ، افزایش می‌یابد [۲۵]، از این رو، پدیده NDR هنگامی که ولتاژ افزایش می‌یابد تکرار می‌شود. به‌طور کلی، می‌توان نواحی شبه‌اهمی و NDR نامتناوب را در نمودار مشخصه I-V پیدا کرد (شکل ۳). عرض نواحی در فواصل مختلف ولتاژ، متفاوت است. می‌توان گفت که ولتاژ بایاس می‌تواند سیستمی را تعدیل کند که در آن می‌تواند به‌عنوان سیم (در ناحیه شبه‌اهمی) یا سوئیچ (در ناحیه NDR) عمل کند. این نشان می‌دهد که رفتار NDR را می‌توان با تنظیم قدرت میدان الکتریکی نور فرودی دستکاری کرد.



شکل ۳. تغییر جریان نوری عبوری از توالی CH22 نسبت به ولتاژ اعمالی الکتروود (عامل ایجاد نواحی NDR نور فرودی است)، فرکانس ۵ تراهرتز و دامنه ۰٫۹.

شکل ۲. تأثیر هم‌زمان فرکانس و دامنه نور فرودی بر روی جریان الکتریکی عبوری از توالی CH22.

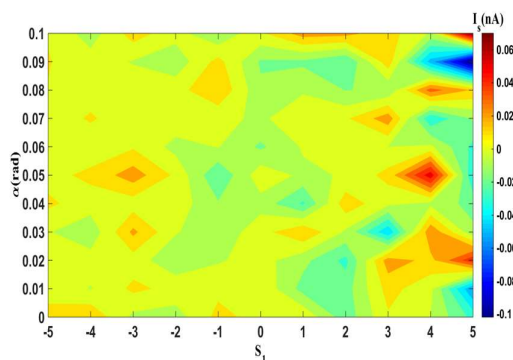


شکل ۲. تأثیر هم‌زمان فرکانس و دامنه نور فرودی بر روی جریان الکتریکی عبوری از توالی CH22.

به‌دلیل تنوع دامنه نور، DNA در فرکانس‌های بالا پاسخ‌های متفاوتی را نشان می‌دهد. بنابراین نقاطی که جریان الکتریکی بیشینه و نقاطی که جریان الکتریکی کمینه را نشان می‌دهند، می‌توانند معرف مناطق روشن و خاموش در یک سوئیچ مرتبط با یک آشکارساز زیستی باشند [۲۲]. با آشکار کردن مقادیر بحرانی دامنه و فرکانس تابش فرودی، قابل توجه است که تأثیر بایاس الکتریکی خارجی بر ایجاد و تغییر چنین مقادیر بحرانی باید در نظر گرفته شود. بنابراین، ترابرد بار الکتریکی در سیم‌های بیومولکولی را می‌توان از طریق منبع ولتاژ کنترل کرد.

در مطالعه فعلی، زنجیره DNA از طریق الکترودهای فلزی به‌اختلاف پتانسیل متصل می‌شود.  $V_b$  در بازه

<sup>1</sup> Juan



شکل ۴. تأثیر هم‌زمان تنش مکانیکی و زاویه پیمش بر روی جریان اسپینی عبوری از توالی CH22.

همان‌طور که در شکل ۴ مشاهده می‌شود، در محدوده‌هایی که تنش منفی وجود دارد، با تغییر زاویه پیمش، تغییر قابل‌ذکری در جریان اسپینی مشاهده نمی‌شود ولی با وارد شدن به محدوده مثبت تنش مکانیکی، تغییر در جریان اسپینی مشاهده می‌شود. این نشان می‌دهد که تنش، با تأثیر بر ناهمسانگردی مغناطیسی منجر به بهبود عملکرد سوئیچینگ اسپین-مدار می‌شود [۲۶]. لذا با رسیدن  $S_1$  به ۴، با تغییر زاویه پیمش، مناطق روشن و خاموش برای طراحی سوئیچ در حسگرها آشکار می‌شود.

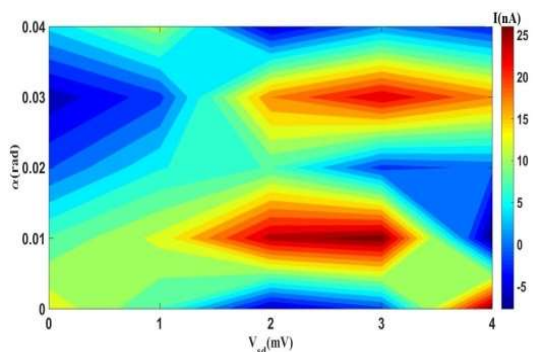
برای دستیابی به جریان‌هایی با گزینش اسپینی بالا در ساختارهای ماریچ و افزایش اثر CISS، روش‌های مختلفی مانند اعمال ولتاژ گیت خارجی پیشنهاد شده‌اند [۲۷]. از طرفی، برهم‌کنش اسپین-مدار را می‌توان با ولتاژ گیت تنظیم کرد. بنابراین، انتقال اسپین را می‌توان به‌طور غیرمستقیم توسط یک ولتاژ کنترل کرد. در این مطالعه، انتقال اسپین ناشی از ولتاژ، در سیستم DNA تعیین می‌شود. در اسپینترونیک مولکولی، فیلتر اسپین در یک نانودستگاه مولکولی را می‌توان با اعمال ولتاژ به‌دست آورد که به این معنی است که حالت مغناطیسی به‌صورت الکتریکی قابل کنترل است. در این راستا، تغییرات هم‌زمان جریان اسپینی نسبت به ولتاژ و زاویه

## نتایج مربوط به آشکارساز تنش

با توجه به اینکه سیستم‌های مولکولی به دلیل ساختار انعطاف‌پذیری که دارند، نامزدهای خوبی برای طراحی نسل جدید دستگاه‌های نانو الکترونیک و نانو اسپینترونیک هستند، به بررسی خواص اسپینترونیک آنها پرداخته می‌شود. در این کار، از نظر تئوری، انتقال اسپین را از طریق یک زنجیره DNA برای کنترل پدیده پیزواسپینترونیک بررسی می‌کنیم.

ما ابتدا انتقال اسپین وابسته به تنش را از طریق مولکول DNA پیمش یافته در حضور یک تنش مکانیکی کوچک بررسی می‌کنیم. هنگامی که یک اختلال تنش مکانیکی در مولکول DNA وجود دارد، تغییرات ساختاری ناشی از تنش و همچنین اصلاح ساختار کلی نوار الکترونیکی وجود دارد. هنگامی که یک تنش کششی ( $S_1 > 0$ ) به مولکول DNA پیمش یافته اعمال می‌شود، انرژی‌های پرش وابسته به تنش، معادله ۱۰، بین دو نزدیکترین همسایگی به صورت تصاعدی سرکوب می‌شود، زیرا فاصله بین مدارهای بین دو جفت باز متوالی افزایش می‌یابد و پیوندهای مولکولی مربوطه ضعیف می‌شوند. این تغییرات ساختاری مولکول DNA باعث ایجاد تغییر در پیوندهای مولکولی بین نوکلئوتیدها می‌شود و کنترل رسانایی را از طریق مولکول DNA تسهیل می‌کند. نتایج ما نشان می‌دهد که یک کرنش کششی جریان‌های وابسته به اسپین را از طریق DNA به دلیل افزایش فاصله بین مدارهای بین دو جفت باز مجاور و تضعیف پیوندهای مولکولی ضعیف می‌کند [۲۰].





شکل ۵. تأثیر هم‌زمان ولتاژ و زاویه بر روی جریان اسپینی عبوری از توالی CH22 به‌ازای تنش ثابت  $S_1 = 4$ .

### جمع‌بندی

یک طرح تشخیص برای تابش تراهرتز بر روی چهارچوب DNA ارائه شد. در نمودارهای مشخصه  $I-V$ ، رفتارهای NDR و شبه‌اهمی مشاهده شده است. با توجه به ساختار انعطاف‌پذیر زنجیره‌های DNA، ساختار DNA دو رشته‌ای تحت یک تنش مکانیکی در نظر گرفته و خواص گزینش اسپینی آن به‌عنوان یک مادهٔ پیزو اسپیترونیک مورد مطالعه قرار گرفته شد. به‌طور کلی، تنش و ولتاژ می‌توانند به‌عنوان ابزارهای کلیدی برای تنظیم خواص پیزو اسپیترونیک دستگاه‌های مبتنی بر DNA عمل کنند که در طراحی آشکارسازهای زیستی نقش مهمی دارند. به‌طور خلاصه، بیشترین جریان الکتریکی از توالی CH22 در محدودهٔ ۴ الی ۵ (THz) فرکانس نور فرودی مشاهده می‌شود. همچنین، جریان اسپینی در تنش مکانیکی اعمالی با شدت  $S_1 = 4$ ، به‌بیشترین مقدار خود می‌رسد، لذا محدوده‌های مورد نیاز برای ساخت یک آشکارساز زیستی طی پژوهش حاضر، میسر می‌شود.

پیچش در حضور تنش مکانیکی ( $S_1 = 4$ ) مورد بررسی قرار می‌گیرد (شکل ۵). نتایج، نقش برجسته تنش مکانیکی خارجی و ولتاژ را در خواص ترابرد اسپینی سیستم نشان می‌دهند.

همان‌طور که مشاهده می‌شود، با افزایش ولتاژ در همهٔ زوایای پیچش، افزایش تقریبی جریان اسپینی وجود دارد. در مقدار ولتاژ  $V = 0.25$ ، با افزایش زاویهٔ پیچش امکان تغییر محدوده‌های رنگی که معرف مناطق روشن و خاموش هستند، میسر می‌شود. همچنین جالب توجه هست اگر به‌نواحی NDR شکل گرفته در تصویر سه بعدی شکل ۵ توجه کنیم. اگر به‌ازای  $\alpha = 0$  و  $\alpha = 0.1$  به‌تحول جریان اسپینی نسبت به تغییرات ولتاژ توجه کنیم. مشخص می‌شود که زمانی که DNA تحت پیچش قرار نداشته باشد حتی با اعمال تنش نیز نواحی NDR شکل نمی‌گیرد که در توافق با یافته‌های هدین<sup>۱</sup> و همکاران می‌باشد [۲۰]. این نشان می‌دهد که آرایش ساختار الکترونیکی بین مولکول DNA و الکترودها، یعنی توزیع بار الکترونیکی در نزدیکی الکترودها، سهم اصلی در وجود NDR در سیستم ما است. هنگامی که یک زاویهٔ پیچش غیر صفر وجود داشته باشد، NDR که توسط میدان الکتریکی عمودی بین مولکول و الکترودها هدایت می‌شود، علاوه بر این، تحت تأثیر یک فشار مکانیکی قرار می‌گیرد که به‌مولکول DNA اعمال می‌شود.

<sup>1</sup> Hedin

Chemistry B, 122 (2018) 2487-2494.  
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b10034>

[3] P.C. Mondal, W. Mtangi, C. Fontanesi, Chiro-Spintronics: Spin-Dependent Electrochemistry and Water Splitting Using Chiral Molecular Films, *Small methods*, 2 (2018) 1700313.  
<https://doi.org/10.1002/smt.201700313>

[4] H. Wang, F. Yin, L. Li, M. Li, Z. Fang, C. Sun, B. Li, J. Shi, J. Li, L. Wang, Twisted DNA origami-based chiral monolayers for spin filtering, *Journal of the American Chemical Society*, (2024).  
<https://doi.org/10.1021/jacs.3c11566>

[5] B. Mikaeeli Kangarshahi, S.M. Naghib, N. Rabiee, DNA/RNA-based electrochemical nanobiosensors for early detection of cancers, *Critical reviews in clinical laboratory sciences*, (2024) 1-23.  
<https://doi.org/10.1080/10408363.2024.2321202>

[6] H. Qi, L. Wang, K.-w. Wong, Z. Du, DNA-quantum dot sensing platform with combined Förster resonance energy transfer and photovoltaic effect, *Applied Physics Letters*, 94 (2009).  
<https://doi.org/10.1063/1.3117193>

[7] M. Minunni, S. Tombelli, M. Mascini, A. Bilia, M.C. Bergonzi, F.F. Vincieri, An optical DNA-based biosensor for the analysis of bioactive constituents with application in drug and herbal drug screening, *Talanta*, 65 (2005) 578-585.  
<https://doi.org/10.1016/j.talanta.2004.07.020>

[8] R. Kobun, Nanotechnology-based optical biosensors for food applications, *Adv Food Anal Tools*, (2021) 147-165.  
<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-820591-4.00008-6>

[9] S. Shi, X. Wang, W. Sun, X. Wang, T. Yao, L. Ji, Label-free fluorescent DNA biosensors based on metallointercalators and nanomaterials, *Methods*, 64 (2013) 305-314.

جدول ۱. پارامترهای مورد استفاده در مدل‌سازی [۲۰-۱۶، ۱۲]

نام پارامتر	مقدار	واحد
$\epsilon_A$	۰٫۰-۷	eV
$\epsilon_T$	۰٫۸۳	eV
$\epsilon_C$	۰٫۵۶	eV
$\epsilon_G$	-۰٫۵۶	eV
$t_{  }$	۰٫۲	eV
$t_{\perp}$	۰٫۱۵	eV
$t_{so}$	۰٫۱۱	eV
$\beta_{\epsilon,k,j}(\beta=L,R)$	۷٫۷۵	eV
$t_p(\beta=L,R)$	۰٫۴۲	ev
$\theta$	۰٫۶۶	rad
$\varphi$	$\pi/5$	
$V_{\perp}$	۰٫۴	eV
$V_{  }$	۰٫۶	eV
U	۰٫۸	eV

## مرجع‌ها

[1] I. Žutić, J. Fabian, S.D. Sarma, Spintronics: Fundamentals and applications, *Reviews of modern physics*, 76 (2004) 323.  
<https://doi.org/10.1143/RevModPhys.76.323>

[2] S. Fathizadeh, S. Behnia, J. Ziaei, Engineering DNA molecule bridge between metal electrodes for high-performance molecular transistor: an environmental dependent approach, *The Journal of Physical*

- (2003) 193103.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.193103>
- [18] S. Behnia, S. Fathizadeh, J. Ziaei, Controlling charge current through a DNA based molecular transistor, *Physics Letters A*, 381 (2017) 36-43.  
<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2016.10.037>
- [19] S. Fathizadeh, S. Behnia, F. Nemati, M. Salimi, H. Borjkhani, Chaotic control of the dynamical behavior of covid-19 through the electromagnetic fields, *Physica Scripta*, 97 (2022) 085008.  
<https://doi.org/10.1088/1402-4896/ac7fc1>
- [20] Y.S. Joe, S. Malakooti, E.R. Hedin, Controllable negative differential resistance on charge transport through strained and tilted DNA molecules, *International Journal of Modern Physics B*, 33 (2019) 1950099.  
<https://doi.org/14.1142/S4217979219544991>
- [21] X. Yang, Q. Wang, K. Wang, W. Tan, J. Yao, H. Li, Electrical switching of DNA monolayers investigated by surface plasmon resonance, *Langmuir*, 22 (2006) 5654-5659.  
<https://doi.org/10.1021/la052907m>
- [22] U. Rant, K. Arinaga, S. Fujita, N. Yokoyama, G. Abstreiter, M. Tornow, Dynamic electrical switching of DNA layers on a metal surface, *Nano Letters*, 4 (2004) 2441-2445.  
<https://doi.org/10.1021/nl0484494>
- [23] C.-J. Xia, D.-S. Liu, H.-C. Liu, X.-J. Zhai, Large negative differential resistance in a molecular device with asymmetric contact geometries: a first-principles study, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 43 (2011) 1518-1521.  
<https://doi.org/10.1016/j.physe.2011.04.020>
- [24] S. Behnia, S. Fathizadeh, A. Akhshani, DNA spintronics: Charge and spin dynamics in DNA wires, *The Journal of Physical Chemistry C*, 120 (2016) 2973-2983.  
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b09907>
- <https://doi.org/10.1016/j.ymeth.2013.07.004>
- [10] J. Li, G. Speyer, O.F. Sankey, Conduction switching of photochromic molecules, *Physical review letters*, 93 (2004) 248302.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.248302>
- [11] H. Wang, H.K. Bisoyi, A.M. Urbas, T.J. Bunning, Q. Li, Reversible circularly polarized reflection in a self-organized helical superstructure enabled by a visible-light-driven axially chiral molecular switch, *Journal of the American Chemical Society*, 141 (2019) 8078-8082.  
<https://doi.org/10.1021/jacs.9b03231>
- [12] S. Behnia, F. Nemati, S. Fathizadeh, Modulation of spin transport in DNA-based nanodevices by temperature gradient: A spin caloritronics approach, *Chaos, Solitons & Fractals*, 116 (2018) 8-13.  
<https://doi.org/14.1416/j.chaos.2410.49.446>
- [13] I. Likhachev, V. Lakhno, The direct investigation of DNA denaturation in Peyrard-Bishop-Dauxois model by molecular dynamics method, *Chemical Physics Letters*, 727 (2019) 55-58.  
<https://doi.org/10.1016/j.cplett.2019.04.027>
- [14] A. Travers, G. Muskhelishvili, DNA structure and function, *The FEBS journal*, 282 (2015) 2279-2295.  
<https://doi.org/10.1111/febs.13307>
- [15] S. Mohammadi, M. Esmailpour, F. Khoeini, Investigation of Graphene and Silicene-DNA nanostructures: DNA Sensing, *Journal of Research on Many-body Systems*, 10(202) 1-12.  
<https://doi.org/10.22055/jrmbms.2020.15567>
- [16] T. Dauxois, M. Peyrard, A.R. Bishop, Entropy-driven DNA denaturation, *Physical Review E*, 47 (1993) R44.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.47.R44>
- [17] J. Yi, Conduction of DNA molecules: A charge-ladder model, *Physical Review B*, 68

[25] S. Lakshmi, S. Dutta, S.K. Pati, Molecular electronics: effect of external electric field, *The Journal of Physical Chemistry C*, 112 (2008) 14718-14730. <https://doi.org/10.1021/jp800187e>

[26] M. Filianina, Z. Wang, L. Baldrati, K. Lee, M. Vafae, G. Jakob, M. Kläui, Impact of the interplay of piezoelectric strain and current-induced heating on the field-like spin-orbit torque in perpendicularly magnetized Ta/Co<sub>20</sub>Fe<sub>60</sub>B<sub>20</sub>/Ta/MgO film, *Applied Physics Letters*, 118 (2021). <https://doi.org/10.1063/5.0035869>

[27] S. Kuzmin, W. Duley, Properties of specific electron helical states leads to spin filtering effect in dsDNA molecules, *Physics Letters A*, 378 (2014) 1647-1650. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2014.04.019>