

## ترابرد الکترونی در رشته DNA متصل به الکترودهای سیلیسینی: طراحی قطعات الکترونیکی

سعیده محمدی و ایوب اسماعیل پور

دانشکده فیزیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران

پست الکترونیکی: s.mohammadi@sru.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۱/۰۵/۲۰؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۱/۰۹/۱۶)

### چکیده:

در این مقاله، ترابرد الکترونی برای یک سامانه متشکل از مولکول DNA دورشته‌ای با توالی تلوامریک متصل به دو الکتروده نیمه‌متناهی نانونوار سیلیسینی مورد مطالعه قرار گرفته است. این مطالعه، با استفاده از مدل تنگ‌بست و رهیافت تابع گرین مورد بررسی قرار گرفته است. با قرار دادن مولکول DNA در وسط دو الکتروده نانونوار سیلیسینی شاهد کانال‌های عبور الکترون در سامانه هستیم و همچنین، نوع بازهای آلی متصل به الکترودها تأثیر به‌سزایی در ترابرد الکترونی سامانه را نشان دادند. محاسبات نشان می‌دهند که توالی‌های تلوامریک مانند: TAGGGT، TTAGGG و GTTAGG نسبت به بقیه توالی‌ها بیشترین رسانش الکترونیکی را دارند. ما دریافتیم که با کنترل ولتاژ گیت (دروازه) در سامانه می‌توان جریان یا رسانش بار را کنترل کرد. همچنین، با افزایش تعداد جفت بازهای آلی در سامانه، شاهد افزایش جریان بودیم و با کنترل تعداد جفت بازهای آلی می‌توان ویژگی‌های ترابردی را کنترل کرد. این توانایی کنترل، کاربرد فراوانی و نقش به‌سزایی در ساخت قطعات الکترونیکی دارد.

واژه‌های کلیدی: مولکول DNA، ترابرد الکترونی، مدارهای الکترونیکی، رهیافت گرین

### ۱. مقدمه

مدار قرار گیرند. مولکول DNA، چهار باز آلی شامل: آدنین، گوانین، سیتوزین و تیمین دارد [۳]. از دیدگاه مکانیک کوانتومی، در مولکول DNA، الکترون‌ها از یک باز آلی به باز آلی بعدی انتقال می‌یابند که این امر عبور بار را در طول مولکول DNA امکان‌پذیر می‌کند. در تئوری روش ترابرد بار اثبات شده است که ترابرد بار شدیداً به بازهای آلی مولکول DNA وابسته است [۴]. در مولکول DNA دورشته‌ای بازهای آلی آدنین و تیمین دو پیوند هیدروژنی و بازهای گوانین با سیتوزین سه پیوند هیدروژنی دارند. بنابراین، جفت باز گوانین-سیتوزین می‌تواند ترابرد بار قوی نسبت به آدنین-تیمین داشته باشند. مطالعات تئوری و تجربی نشان دادند که گوانین نقش به‌سزایی در ترابرد بار در مولکول DNA دارد

مولکول دی‌اواسی ریبونوکلیتیک اسید (DNA) ویژگی‌های منحصر به فردی مانند: خاصیت خود تشخیص، خودسامان‌دهی با خودآرایی دارد و ساختار ویژه این مولکول باعث شده است که در طراحی مدارهای الکترونیکی مورد استفاده قرار گیرد [۱]. با اندازه‌گیری مستقیم رسانش از مولکول DNA با اعمال یک ولتاژ بین دو رسانا مشخص شده است که بنابه شرایط، مولکول DNA رفتار الکترونیکی متفاوتی از جمله: عایق، هادی اهمی و نیم‌هادی از خود نشان می‌دهد [۲]. در علم الکترونیک مولکولی، مولکول‌هایی مانند: مولکول‌های کوچک، پلیمر و مولکول DNA می‌توانند به‌عنوان جزئی از یک

اتصال بالقوه با مولکول DNA، امکان طراحی مدارهای الکترونیکی را فراهم می‌کند.

## ۲. مدل و روش

در این پژوهش، با استفاده از مدل تنگ‌بست و مدل نردبانی مولکول DNA، هامیلتونی برای مولکول DNA بیان می‌شود. در ادامه، برای بررسی ترابرد الکترونی مولکول DNA، این مولکول به دو الکتروود که شامل نانونوارهای سیلیسینی است، متصل می‌شود. این سامانه نیز به ولتاژ دروازه متصل می‌شود. در شکل ۱ این سامانه نمایش داده شده است.

### ۲.۱. مدل تنگ‌بست DNA

ابتدا، با مدل تنگ‌بست هامیلتونی DNA دو رشته‌ای برای رشته اول به صورت زیر بیان می‌شود [۹، ۱۳ و ۱۴]:

$$H_{s_1} = \varepsilon_G b_i^\dagger b_i + \sum_{i=n-2}^{i+1} \varepsilon_G b_i^\dagger b_i + t_{\parallel} \sum_{i=1}^{n-1} [b_i^\dagger b_{i+1} + h.c.], \quad (1)$$

و رشته دوم

$$H_{s_2} = \varepsilon_C c_{n+1}^\dagger c_{n+1} + \sum_{i=N-2}^N \varepsilon_C c_i^\dagger c_i + t_{\parallel} \sum_{i=n+1}^{N-1} [c_i^\dagger c_{i+1} + h.c.], \quad (2)$$

و برهم‌کنش دو رشته با هم

$$H_{s_1+s_2} = t_{\perp} \sum_{i=1}^n [b_i^\dagger c_i + h.c.], \quad (3)$$

در معادله‌های (۱) تا (۳) متغیرها به این صورت تعریف می‌شوند:  $b_{i,i}^\dagger$  و  $b_{i,i}$  عملگرهای خلق و فنا الکترون‌ها در اولین رشته DNA در سایت  $i$  و  $c_i^\dagger$  ( $c_i$ ) عملگرهای خلق و فنا الکترون‌ها در رشته دوم DNA را نشان می‌دهد،  $t_{\parallel} = 0.35 \text{ (eV)}$  انرژی جهش بین دو باز آلی مجاور هم، مانند  $A-T$  و  $C-G$  و  $t_{\perp} = 0.05 \text{ (eV)}$ ، انرژی جهش بین دو باز آلی عمود برهم مانند  $A-T$  و  $C-G$  است. انرژی‌های جایگاهی برای بازهای آلی برابر با  $\varepsilon_A = 1.24 \text{ (eV)}$ ،  $\varepsilon_G = 1.75 \text{ (eV)}$  و  $\varepsilon_C = 1.85 \text{ (eV)}$ ،  $\varepsilon_T = 1.14 \text{ (eV)}$  است [۲]. مولکول DNA دورشته‌ای با  $\tau = 0.35 \text{ (eV)}$  به الکتروودهای نیمه‌متناهی متصل می‌شود.

زیرا گوانین کمترین انرژی یونیزاسیون نسبت به بقیه بازهای DNA را دارد [۵ و ۶]. در نتیجه، در حالت کلی می‌توان گفت که انتقال بار الکتریکی در مولکول DNA ناشی از جفت بازهای گوانین با سیتوزین است و جفت بازهای آدین- تیمین در نقش سد پتانسیل عمل می‌کنند. بنابراین، هر چه فاصله جفت بازهای گوانین با سیتوزین در یک مولکول DNA زیادتر باشد، انتقال بار الکتریکی در این مولکول کمتر می‌شود. در تقریب تنگ‌بست مدل‌های فیزیکی مانند: یک‌بعدی، دوکاناله، استخوان ماهی و نردبانی برای مولکول DNA پیشنهاد شده است [۷] که مدل نردبانی ترکیبی از مدل دوکاناله و استخوان ماهی است. همان‌گونه که بیان شد شرایطی که در آن ترابرد الکترونی مولکول DNA بررسی می‌شود، در رفتار الکترونیکی این مولکول تأثیر به‌سزایی دارد. در نتیجه، منطقی به نظر می‌رسد که برای استفاده مولکول DNA در مدارهای الکترونیکی به دنبال ساختارهایی باشیم که در آن سامانه، این مولکول رفتار یک رسانا یا نیم‌رسانا را به نمایش بگذارد. یکی از مهیج‌ترین راه‌حل‌ها برای این موضوع، اتصال این مولکول با دستگاه‌های مبتنی بر آلوتروپ‌های کربن است [۸]. ما در مقاله قبلی خود که رسانش الکتریکی یک مولکول DNA عبوری از یک نانوحفره را بررسی کردیم به این نتیجه دست یافتیم که نانونوار سیلیسین گاف انرژی بسیار بزرگ‌تر نسبت به گرافین (در این شرایط) دارد [۹]. همچنین، یک پژوهش ترابرد الکترونی برای این مولکول را در نانوحفره سیلیسین بررسی کردند. آنها نشان دادند که سیلیسین شرایط مناسبی برای اتصال با مولکول DNA دارد [۱۰]. سیلیسین ساختار لانه-زنبوری از اتم‌های سیلیکون دارد که به دلیل داشتن قدرت اسپین - مدار ذاتی قوی یک ساختار مناسب برای قطعات الکترونیکی است [۱۱]. همچنین، این ماده به دلیل دارا بودن پیوند  $sp^3$  توانایی ایجاد پیوند قوی با بازهای آلی DNA را دارد. بنابراین، برای آشکارسازی بازهای آلی DNA از این ماده می‌توان استفاده کرد [۱۲]. در این مقاله، ما رسانش الکتریکی مولکول DNA با مدل نردبانی که به دو الکتروود سیلیسینی متصل است را بررسی می‌کنیم. با توجه به مطالب بیان شده، ما باور داریم که اتصال نانونوارهای سیلیسین به‌عنوان یک

سیلیسینی،  $\eta_i = \pm 1$  برای زیر شبکه  $A$  و  $B$ ، شدت میدان تبدلی  $M_z = 2\lambda_{SO}$ ، شدت اسپین-مدار راشبا با  $\lambda_R = 0.7 (meV)$  است. جمله اول، جهش بین همسایه‌های اول با انرژی  $t = 1.6 (eV)$  است، جمله دوم، برهم‌کنش اسپین-مدار ذاتی بین همسایه‌های دوم را نشان می‌دهد. جمله سوم، مربوط به پتانسیل است که در اثر اعمال میدان الکتریکی عمود بر سطح  $E_z$  بین دو زیر شبکه  $A$  و  $B$  به وجود می‌آید. جمله چهارم، مغناطش تبدلی را نشان می‌دهد که میزان تبدلی  $M_z$  ممکن است در اثر مجاورت سیلیسین با یک فرومغناطیس مانند رشد اتم‌های آهن به سطح سیلیسین یا رشد سیلیسین روی یک زیرلایه عایق فرومغناطیس<sup>۲</sup> به وجود می‌آید [۱۷]. جمله‌های پنجم و ششم، برهم‌کنش اسپین-مدار راشبا ( $\lambda_R$ ) بین همسایه‌های اول و دوم را نشان می‌دهد که  $\mu_{ij} = +1$  برای اتم‌های زیر شبکه  $A$  و  $\mu_{ij} = -1$  برای اتم‌های زیر شبکه  $B$  و همچنین،  $\bar{d}_{ij}^0 = \bar{d}_{ij} / |d_{ij}|$  بردار یکه در جهت برداری است که اتم‌های  $i$  و  $j$  را به هم متصل می‌کند، و  $v_{ij} = (\bar{d}_i \times \bar{d}_j) / |\bar{d}_i \times \bar{d}_j|$  که  $\bar{d}_i$  و  $\bar{d}_j$  نزدیک‌ترین پیوندهایی هستند که همسایه‌های دوم را به هم متصل می‌کنند.

### ۲.۳. روش تابع غیر تعادلی گرین

برای مطالعهٔ رسانش الکترون و جریان برای سامانهٔ مورد مطالعه از روش تابع گرین استفاده می‌شود. تابع گرین در زیر فضای قطعه به صورت زیر است [۱۸].

$$G_S(E) = [(E + i\eta)I - H_{DNA} - U - \Sigma_L - \Sigma_R]^{-1}, \quad (5)$$

در رابطه (۵)،  $H_{DNA}$  هامیلتونی رشته DNA،  $\eta$  یک مقدار خیلی کوچک،  $U$  پتانسیل دروازه و  $\Sigma_{L(R)}$  خود انرژی‌های الکترون چپ (راست) است که به صورت زیر محاسبه می‌شود:

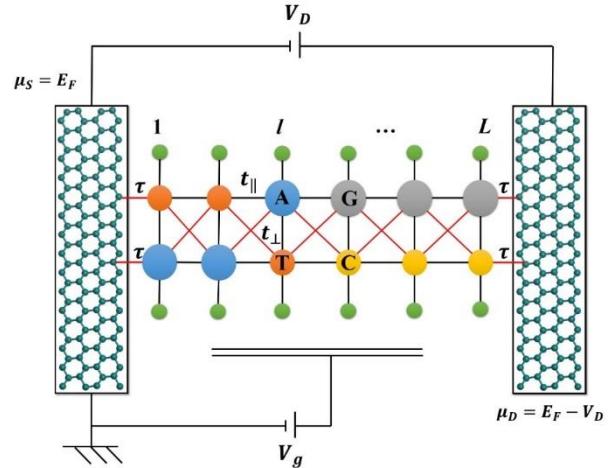
$$\Sigma_L = H_{\alpha,1}^\dagger g_{\alpha,1}^L H_{\alpha,1}, \quad (6)$$

$$\Sigma_R = H_{\alpha,2}^\dagger g_{\alpha,2}^R H_{\alpha,2}, \quad (7)$$

که  $g_{\alpha,1}^L$  و  $g_{\alpha,2}^R$  به صورت زیر بیان می‌شود:

$$g_{\alpha,1}^L = [(E + i\eta)I - H_{\alpha,1} - H_{\alpha,1}^\dagger \tilde{T}]^{-1}, \quad (8)$$

$$g_{\alpha,2}^R = [(E + i\eta)I - H_{\alpha,2} - H_{\alpha,2}^\dagger T]^{-1}, \quad (9)$$



شکل ۱. نمایی از مولکول DNA دو رشته‌ای مدل نردبانی در تقرب تنگ‌بست متصل به دو الکتروده نیمه‌متناهی سیلیسینی همراه با نمایش انرژی جهش بین بازهای آلی.

### ۲.۲. مدل تنگ‌بست نانونوار سیلیسینی

حال، هامیلتونی نانونوار سیلیسین در مدل تنگ‌بست را با در نظر گرفتن برهم‌کنش بین همسایه‌های اول و دوم به صورت زیر می‌توان نوشت [۱۵ و ۱۶]:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \alpha} e_{i\alpha}^\dagger e_{j\alpha} + i \frac{\lambda_{SO}}{\sqrt{3}} \sum_{\langle ij \rangle} v_{ij} e_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z e_{j\beta} + \sum_{i,\alpha} V_i \eta_i e_{i\alpha}^\dagger e_{j\alpha} + M \sum_{i,\alpha} e_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z e_{j\alpha} - i \frac{\lambda_R}{3} \sum_{\langle ij \rangle} \mu_{ij} e_{i\alpha}^\dagger (\sigma \times \hat{d}_{ij})_{\alpha\beta}^z e_{j\beta} + i \lambda_R (E_z) \sum_{\langle ij \rangle} e_{i\alpha}^\dagger (\sigma \times \hat{d}_{ij})_{\alpha\beta}^z e_{j\beta}, \quad (4)$$

در معادله (۴) متغیرها به صورت زیر تعریف می‌شوند:  $(e_{i\alpha}^\dagger) e_{i\alpha}$  عملگرهای فنا (خلق) الکترون‌ها با اسپین  $\alpha$ ، که می‌تواند  $\uparrow$  یا  $\downarrow$  باشد. در نقطه  $\bar{R}_i$ ،  $\langle ij \rangle$  و  $\langle\langle ij \rangle\rangle$  به ترتیب جهش بین اولین و دومین همسایه‌ها،  $\lambda_{SO} = 3.9 (eV)$  [۱۶] قدرت برهم‌کنش اسپین-مدار ذاتی،  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  ماتریس‌های پائولی،  $v_{ij} = \pm 1$  برای حرکت ساعتگرد و پادساعتگرد انرژی جهش،  $V_i = le E_z$  پتانسیل الکتریکی که  $2l = 0.46 \text{ \AA}$  [۱۶] و میدان الکتریکی  $E_z = 40 (mV/l)$  عمود بر ورقه نانونوار

<sup>1</sup> Nearest/next-nearest-neighbor Hopping

<sup>2</sup> Ferromagnetic Insulating Substrate

زیادی وجود ندارد.

در حالت کلی، جریان به صورت زیر بیان می شود:

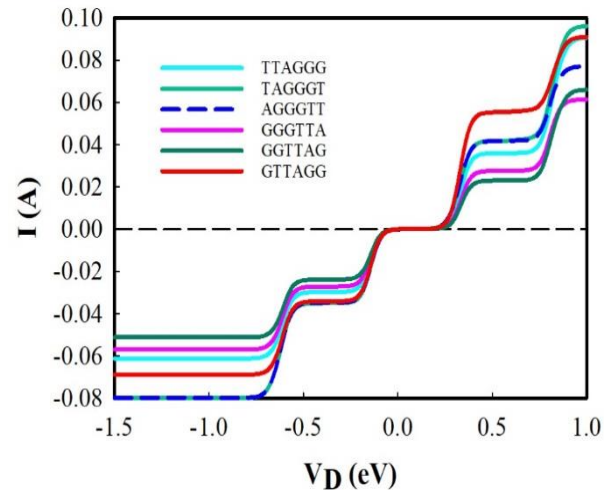
$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E) [f_s(E) - f_D(E)] dE \quad (18)$$

در محدوده دماهای پایین،  $|e|V_D = \mu_s - \mu_D \gg k_B T$ ، ما داریم  $f_{s,D}(E) = \Theta(\mu_{s,D} - E)$  که تابع پله ای است. بنابراین، جریان را می توان به صورت زیر بازنویسی کرد [۲۲]:

$$I = -\frac{2e}{h} \int_{\mu_s}^{\mu_D} T(E) dE. \quad (19)$$

### ۳. بحث و بررسی نتایج

برای بررسی ترابرد کوانتومی در توالی تلومریک<sup>۱</sup>، نقش تغییرات احتمالی در محل اتصال به نانونوار سیلیسین مورد مطالعه قرار می گیرد. در پژوهش های قبلی نشان داده شده است که در توالی تلومریک پله های قوی تری وجود دارد که همان کانال های عبور الکترون است، این امر به دلیل این است که هر نوار انرژی به چندین زیر نوار تقسیم می شود [۲۳]. به همین منظور در این مقاله، از توالی تلومریک برای بررسی ترابرد الکترونی استفاده می شود. در این مقاله، ما سه هدف را دنبال می کنیم. اولی مربوط به تأثیر و وابستگی جفت بازهای آلی توالی تلومریک است که به نانونوار سیلیسین متصل شده اند. دومی، مربوط به وابستگی ویژگی های الکتریکی سامانه به ولتاژ دروازه است. هدف سوم تأثیر تعداد جفت بازهای آلی در رسانش الکترونی سامانه است. در شکل ۲، نمودار جریان بر حسب ولتاژ دروازه برای توالی تلومریک متفاوت نشان داده شده است. در این نمودار توالی های TTAGGG، TAGGGT، AGGGTT، GGGTTA، GGTTAG و GTTAGG مورد بررسی قرار می گیرد. همان طور که گفته شد این توالی ها به دو الکترون نیمه متناهی نانونوار سیلیسینی از طریق انرژی جهش  $\tau$  متصل شده است. در نمودار جریان بر حسب ولتاژ مشاهده می شود که یک گاف انرژی در ولتاژهای آستانه در سامانه مشاهده می شود که این به دلیل وجود بازهای آلی در قطعه مرکزی است [۷]. در واقع، وجود نوکلوتیدهای DNA یک گاف انرژی را بین بالاترین و پایین ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده باز می کند، که در



شکل ۲. نمودار جریان بر حسب ولتاژ برای توالی های مختلف تلومریک در ولتاژ دروازه  $V_g = 9.78 (eV)$ .

در معادله های (۸) و (۹)،  $M$  تعداد سلول های واحد در سامانه،  $H_{s,n}$  و  $H_{-1,n}^\dagger$  به ترتیب هامیلتونی یک سلول واحد و هامیلتونی بین دو سلول واحد در الکترونها هستند. در معادلات بالا  $T$  و  $\tilde{T}$  از روابط برگشت پذیر زیر به دست می آید [۱۳، ۱۹ و ۲۰]:

$$T = t_1 + t_1 t_1 + t_1 t_1 t_1 + \dots + t_1 t_1 \dots t_n, \quad (10)$$

$$\tilde{T} = \tilde{t}_1 + \tilde{t}_1 \tilde{t}_1 + \tilde{t}_1 \tilde{t}_1 \tilde{t}_1 + \dots + \tilde{t}_1 \tilde{t}_1 \dots \tilde{t}_n, \quad (11)$$

$$t_i = (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} t_{i-1}^\dagger, \quad (12)$$

$$\tilde{t}_i = (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} \tilde{t}_{i-1}, \quad (13)$$

$$t_s = [(E + i\eta)I - H_{s,n}^\dagger]^{-1} H_{s,n}^\dagger, \quad (14)$$

$$\tilde{t}_s = [(E + i\mu)I - H_{-1,n}]^{-1} H_{-1,n}. \quad (15)$$

با استفاده از معادله های بالا می توان عبوردهی الکترون را به صورت زیر نوشت [۱۸]:

$$T(E) = Tr[\Gamma_L G_S^\dagger \Gamma_R G_S], \quad (16)$$

$$\Gamma_{L(R)}(E) = i[\Sigma_{L(R)}^\dagger(E) - \Sigma_{L(R)}(E)]. \quad (17)$$

با استفاده از صورت مندی لاندائو، رسانش با رابطه  $G = (2e^2/h)T(E_F)$  محاسبه می شود [۱۸]. سطوح فرمی در منبع و تخلیه به ترتیب برابر با  $\mu_s = E_F$  و  $\mu_D = E_F + eV_D$  است. پتانسیل دروازه  $U$ ، که به ما امکان مدل سازی اثرات شارژ را در حضور ولتاژ سوئیچ می دهد [۲۱]، می تواند به صورت  $U = eV_g$  بیان شود؛ با این فرض که با اعمال ولتاژ سوئیچ بین الکترونها توزیع مجدد بار

<sup>1</sup> Telomeric Sequence

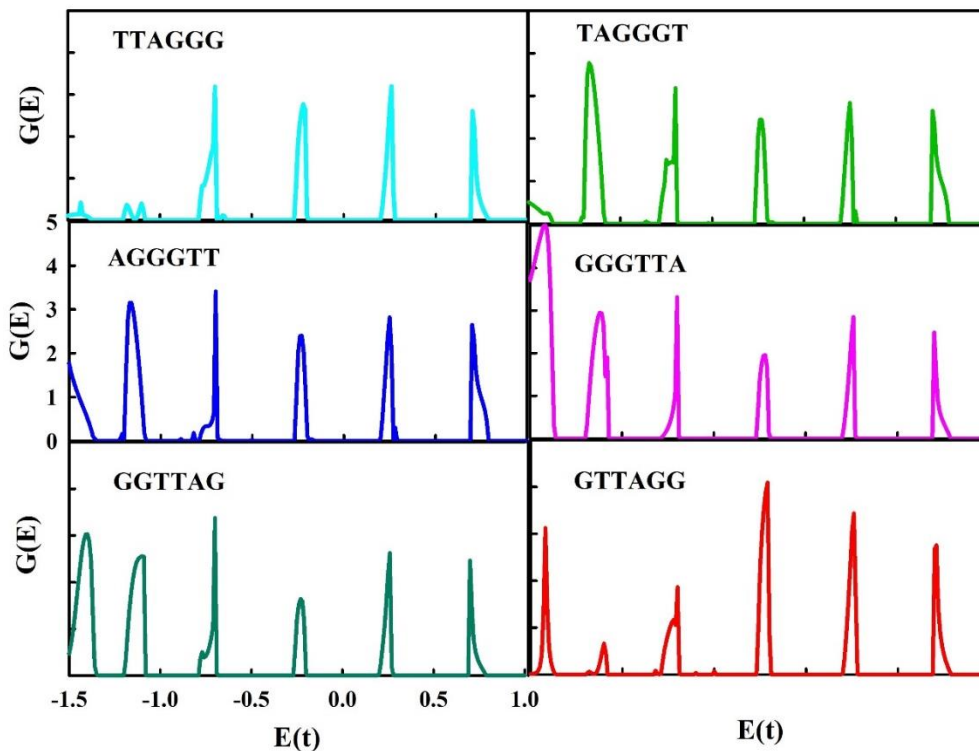
این پیوند می‌تواند قوی باشد. بنابر مرجع [۱۴] باز آلی  $T$  یک سد انرژی برای انتقال بار تشکیل می‌دهد در حالی که بار از طریق بازهای آلی  $G$  انتقال می‌یابد، که در این صورت انرژی-های هر باز آلی با خودش نزدیک به انرژی فرمی در الکترودها هستند.

حال، به‌منظور نمایش بهتر تأثیر ولتاژ دروازه بر ویژگی‌های الکتریکی سامانه، نمودار جریان بر حسب ولتاژ برای ولتاژهای دروازه متفاوت برای دو توالی  $GGGTTA$  و  $TTAGGG$  بررسی می‌شود. در شکل ۴ برای  $V_g = 8(eV)$  مشاهده می‌شود که در جاهایی که  $V_D$  منفی است، جریان پایین‌تری را نشان می‌دهد. این امر به دلیل احتمال انتقال کمتر برای اوربیتال‌های مولکولی اشغال شده در مقایسه با اوربیتال‌های مولکولی اشغال نشده است [۲]. همچنین، این امر را می‌توان ناشی از جریان‌های اشباع در نمودار جریان - ولتاژ با محدوده انرژی فراتر از نوارهای عبور الکترون مرتبط دانست. همچنین، برای ولتاژهای دروازه برابر با ۶ و ۹٫۸ الکترون ولت در قسمت  $V_D$  منفی، جریان الکتریکی بیشتر نسبت به ۸ الکترون ولت مشاهده می‌شود. اگر در شکل ۴ دقت شود مشاهده می‌شود که با کنترل ولتاژ دروازه در سامانه می‌توان جریان یا عبور حامل‌های بار را کنترل کرد.

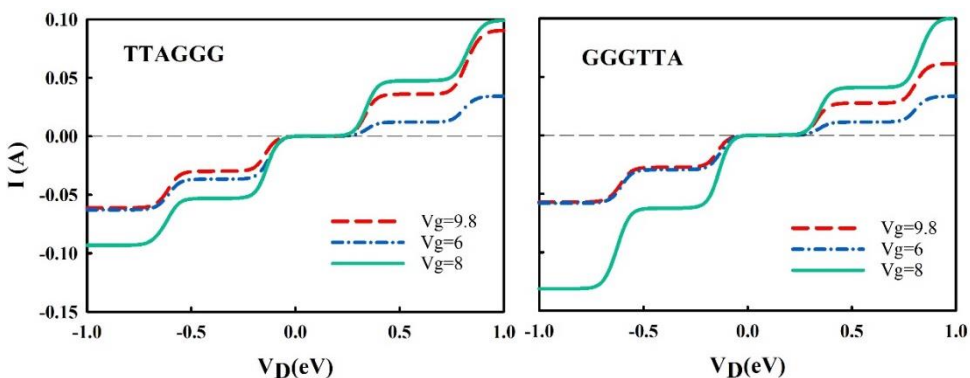
در ادامه به مطالعه تأثیر تعداد جفت بازهای آلی برابر با ۱، ۴ و ۱۲ در قطعه مرکزی که متصل به دو الکترودهای نیمه‌متناهی سیلیسینی است، خواهیم پرداخت (شکل ۵). در این شکل ما شاهد این هستیم که با افزایش تعداد جفت بازهای آلی ساختار پله‌ای یا همان جریان عبوری الکترون افزایش یافته است. همچنین، در این حالت، مشاهده می‌شود که با کنترل تعداد جفت بازهای آلی متصل به الکترودهای سیلیسینی گاف انرژی قابل کنترل است.

شکل ۲ برای منحنی‌های  $I-V$  نشان‌دهنده ولتاژ آستانه است [۲۴]. در این نمودار، ولتاژ دروازه برابر ۹٫۸ الکترون ولت ( $V_g = 9.8(eV)$ ) در نظر گرفته می‌شود که این امر باعث می‌شود که انرژی فرمی نزدیک به نصف گاف انرژی فرض شود. همچنین، این نتایج برای تعداد جفت بازهای آلی برابر با ۱۲ نمایش داده شده است. برای ولتاژهای اعمال شده به اندازه کافی بالا، کل نوارهای در محدوده انرژی فرمی نمایش داده می‌شود که منجر به اشباع جریان در این محدوده می‌شود. همان‌طور که از شکل مشخص است پله‌هایی مشاهده می‌شود که این پله‌ها نشان‌دهنده کانال‌های عبور الکترون است. در این شکل مشاهده می‌شود که بیشترین احتمال عبور مربوط به توالی‌های  $TAGGGT$ ،  $TTAGGG$  و  $GTTAGG$  است. وقتی جریان برای مدل‌های مختلف بررسی می‌شود، مشاهده می‌کنیم که هر پله دارای یک انرژی یکسان است، اگرچه دامنه پله‌ها متغیر است. در این شکل، یک حساسیت قوی جریان تونل‌زنی شده بر حسب ولتاژ دروازه برای توالی‌های متفاوت مشاهده شد.

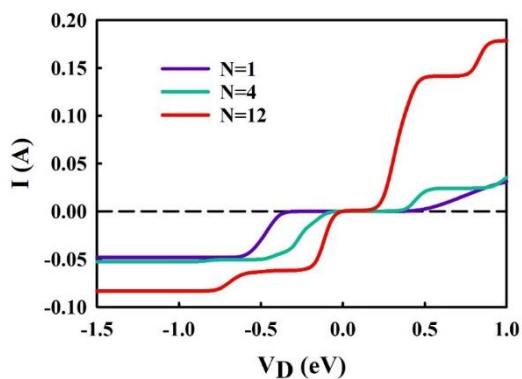
پله‌ها یا کانال‌های عبور در شکل ۲ مرتبط با تشدیدها یا قله‌ها در نمودار رسانش الکترون است (که در شکل ۳ نمایش داده شده است). این قله‌ها احتمال عبور الکترون را به نمایش می‌گذارند. چنین تشدیدهایی در توالی تلومریک به دلیل مجزا شدن یک نوار انرژی به چنین زیرنوار انرژی قوی است. همان‌طور که مشاهده می‌شود در این محدوده رسانش، الکترون برای توالی‌های  $TAGGGT$ ،  $GGGTTA$ ،  $GTTAGG$  و  $TTAGGG$  بیشتر است. بنابراین، ما دریافتیم که با انتخاب نوع باز آلی که به الکترودها متصل است می‌توان احتمال عبور را برای یک انرژی معین تغییر داد. پس، از نمودارهای ۲ و ۳ درمی‌یابیم که بسته به نوع بازهای آلی که به نانونوار سیلیسینی متصل هست،



شکل ۳. رسانش الکتریکی بر حسب انرژی الکترون برای توالی‌های متفاوت تلومریک که ولتاژ دروازه برابر با  $V_g = 9.8(eV)$  در نظر گرفته شده است.



شکل ۴. جریان الکتریکی بر حسب ولتاژ برای ولتاژ دروازه‌های متفاوت در توالی‌های TTAGGG و GGGTTA.



شکل ۵. نمودار جریان بر حسب ولتاژ برای تعداد متفاوتی از جفت بازهای آلی با ولتاژ دروازه  $V_g = 9.8(eV)$  برای توالی TTAGGG.

## ۴. نتیجه گیری

در این پژوهش، با استفاده از مدل تنگبست و رهیافت تابع گرین به مطالعه ترابرد الکترونی مولکول DNA دو رشته‌ای مدل نردبانی با توالی تلوامریک متصل به دو الکتروده نیمه‌متناهی نانونوار سیلیسینی پرداخته می‌شود. در این پژوهش، با قرار دادن بازهای آلی در وسط دو الکتروده سیلیسینی شاهد پله‌هایی در نمودار جریان - ولتاژ شدیم که این پله‌ها همان کانال‌های عبور الکترون را به نمایش می‌گذارد. نوع توالی و نوع جفت بازهای آلی متصل به الکترودها تأثیر به‌سزایی در رسانش الکترونیکی را نشان داد. از بین توالی‌های مورد مطالعه سه توالی TAGGGT، TTAGGG و GTTAGG ترابرد الکترونیکی بالایی را نمایش

دادند. با تغییر در ولتاژ دروازه، ما شاهد جریان کمتری در  $V_D$  منفی برای ولتاژ دروازه برابر ۸ بودیم. این امر ناشی از احتمال عبور الکترون کمتر برای اوربیتال‌های مولکولی اشغال شده در مقایسه با اوربیتال‌های مولکولی اشغال نشده است. همچنین، با کنترل ولتاژ دروازه در سامانه می‌توان رسانش الکترون به عبارت دیگر ترابرد الکترونی را کنترل کرد. در ادامه، تأثیر تعداد جفت بازهای آلی در داخل قطعه مرکزی بررسی شد که مشاهده شد با افزایش تعداد این جفت بازهای آلی جریان الکترونیکی افزایش پیدا می‌کند. همچنین، با کنترل تعداد این جفت بازها می‌توان گاف انرژی را کنترل کرد. بنابراین، با استفاده از این توانایی کنترل می‌توان گام بزرگی در طراحی ساخت مدارهای الکترونیکی و قطعات الکترونی برداشت.

## مراجع

1. D Porath, N Lapidot, and J Gomez-Herrero, "Charge transport in DNA-based devices, in *Introducing Molecular Electronics*", Springer (2006).
2. C J Paez, P A Schulz, N R Wilson, and R A Romer, *New J. Phys.* **14** (2012) 093049.
3. H Lodish, A Berk, C A Kaiser, M Krieger, M P Scott, A Bretscher, H Ploegh, and P Matsudaira, "Molecular Cell Biology", Biological Sciences, 6th Edition, (2000).
4. R G Endres, D L Cox, and R R Singh, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 1 (2004) 195.
5. D Umadevi and G N Sastry, *J. Phys. Chem. Lett.* **2** (2011) 1572.
6. D Le, A Kara, E Schroder, P Hyldgaard, and T S Rahman, *J. Phys. Condens. Matter.* **24** (2012) 424210.
7. G Cuniberti, L Craco, D Porath, and C Dekker, *Phys. Rev. B* **65**, 24 (2002) 241314.
8. S Akca, A Foroughi, D Frochtzvajg, and H W C Postma, *PLoS ONE* **6** (2011) 18442.
9. S Mohammadi, F Khoeini, M Esmailpour, A Esmailpour, and M Akbari-Moghanjoughi, *Chem. Phys.* **541** (2021) 111048.
10. H Sadeghi, S Bailey, and C J Lambert, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 10 (2014) 103104.
11. H Ma, M Liu, L Wen, Q Li, H Chen, and X Yi, *Results Phys.* **20** (2021) 103752.
12. T H Osborn and A A Farajian, *Nano Res.* **7**, 7 (2014) 945.
13. S Mohammadi, F Khoeini, M Esmailpour, and M Khalkhali, *Superlattice. Microst.* **130** (2019) 182.
14. N V Grib, D A Ryndyk, R Gutierrez, and G Cuniberti, *J. Biophys. Chem.* **1** (2010) 20.
15. S Mohammadi, A Phirouznia, and M Esmailpour, *Phys. E Low-dimens. Syst. Nanostruct.* **133** (2021) 114803.
16. K Shakouri, H Simchi, M Esmaeilzadeh, H Mazidabadi, and F M Peeters, *Phys. Rev. B* **92** (2015) 035413.
17. M Ezawa, *Phys. Rev. Lett.* **109** (2012) 055502.
18. S Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems", Cambridge University Press, Cambridge, England, 1995. "Quantum Transport: Atom to Transistor", Cambridge University Press, England, (2005).
19. M P L Scancho, J M L Sancho, and J Rubio, *Phys. F: Met. Phys.* **14** (1984) 1205.
20. T C Li and S P Lu, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 085408.
21. P Damle, T Rakshit, M Paulsson, and S Datta, *IEEE Trans. Nanotechnol.* **1** (2002) 145-53.
22. S Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems", Cambridge: Cambridge University Press (1999).
23. D K Klotsa, R A Romer, and M S Turner, *Biophys. J.* **89** (2005) 2187.

24. M Kitayner, H Rozenberg, R Rohs, O Suad, D Rabinovich, B Honig, and Z Shakked, *Nature Structural & Molecular Biology*, **17**, 4 (2010) 423.