

KUANTUM TÜNELLEME ETKİSİ VE DNA'DA NOKTA MUTASYONLARIN ZAMANI

DURMUŞ ALİ DEMİR

Sabancı
Universitesi

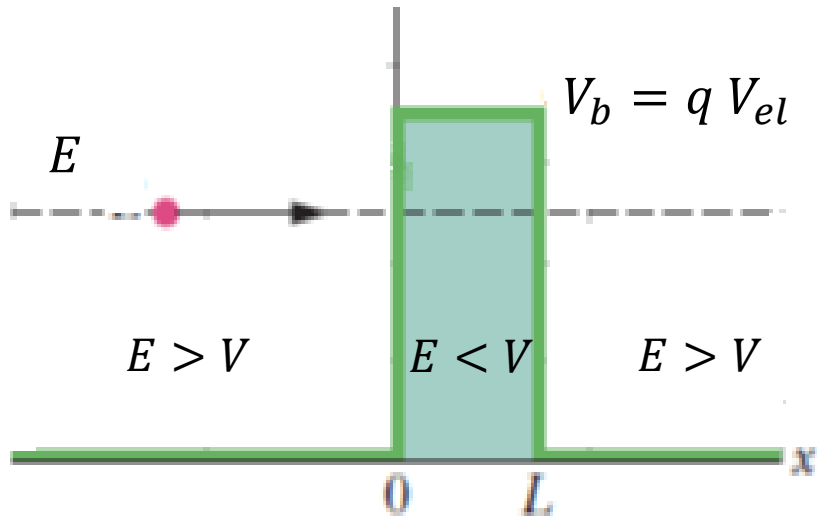
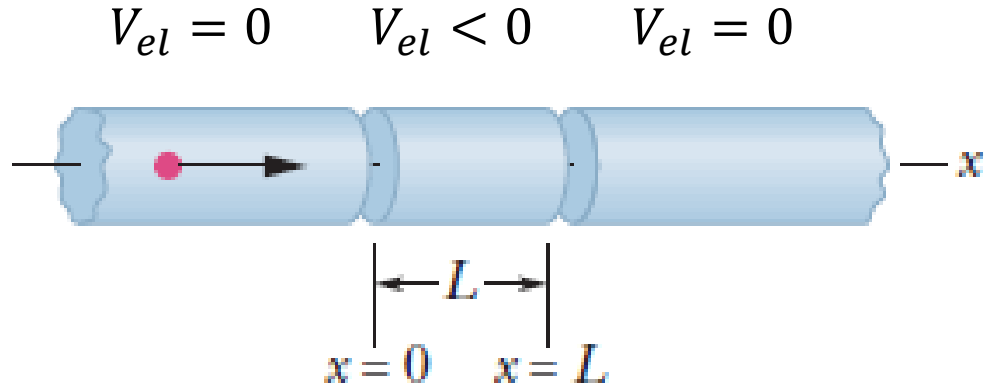


YAKIN DOĞU ÜNİVERSİTESİ

DESAM Semineri (13/10/2021)

Kuantum Tünelleme Etkisi

Kuantum Tünelleme Etkisi



elektron telin $V_{el} < 0$ bölgesinden geçebilir mi?

Klasik mekanik:

Geçemez!

$x=0$ noktasından geri döner!

Kuantum Mekaniği:

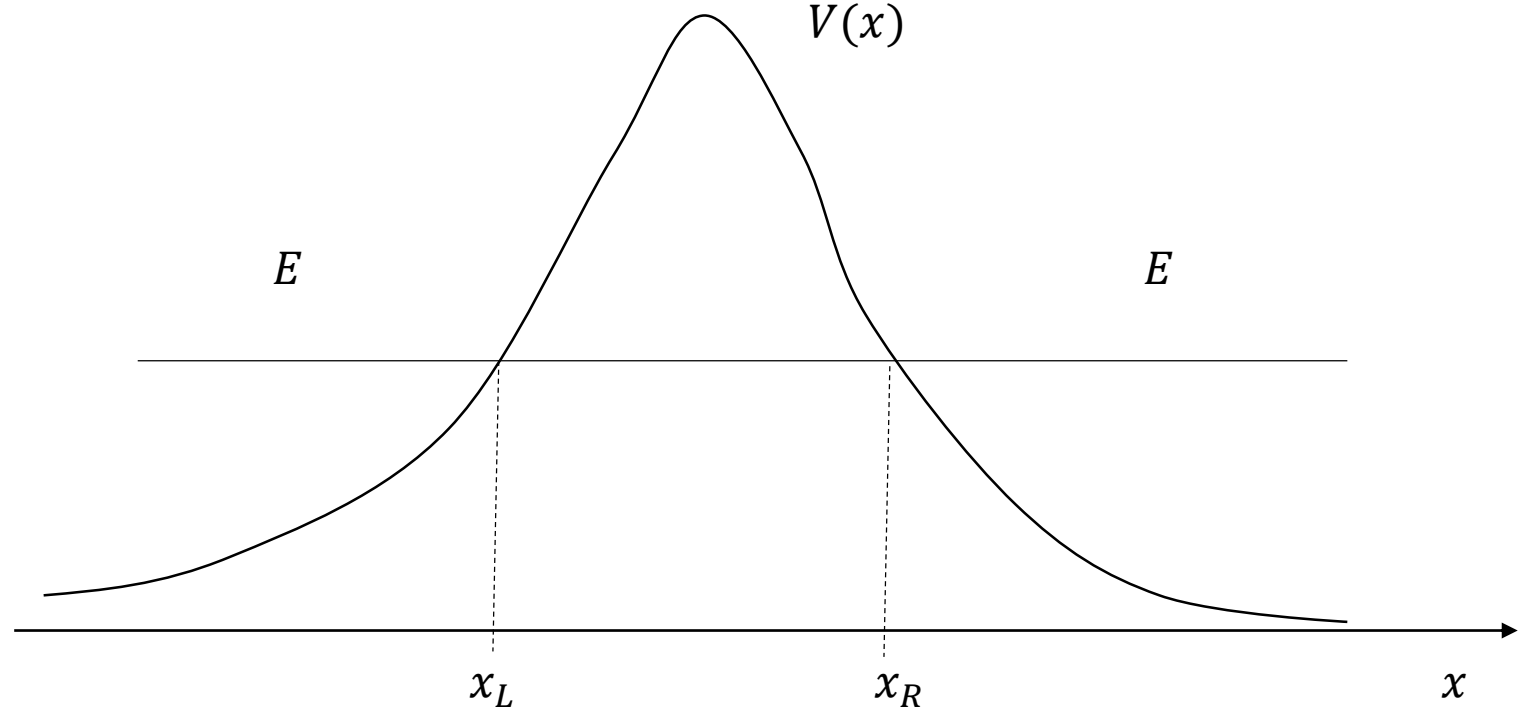
Geçebilir!

$x > L$ geçmek olasıdır!

geçiş olasılığı:

$$\mathcal{T} \sim e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V_b - E)} L}$$

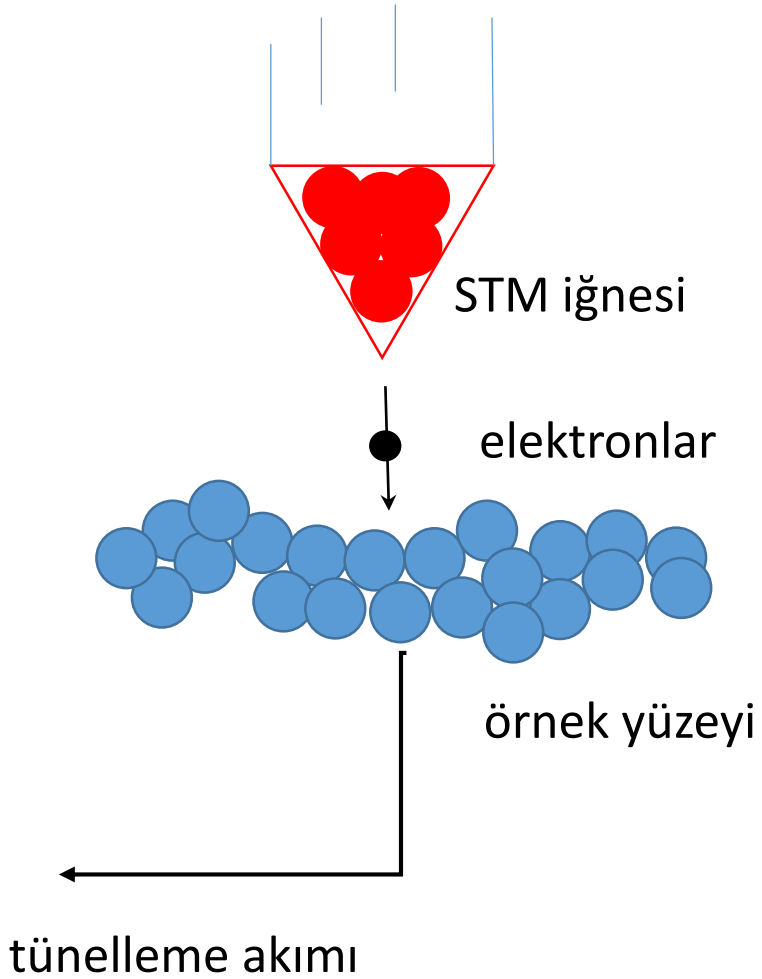
Kuantum Tünelleme Etkisi



- E = parçacığın toplam enerjisi
- $V(x)$ = parçacığın potansiyel enerjisi
- x_L = soldan gelen klasik parçacıkların geri dönüş noktası
- x_R = sağdan gelen klasik parçacıkların geri dönüş noktası

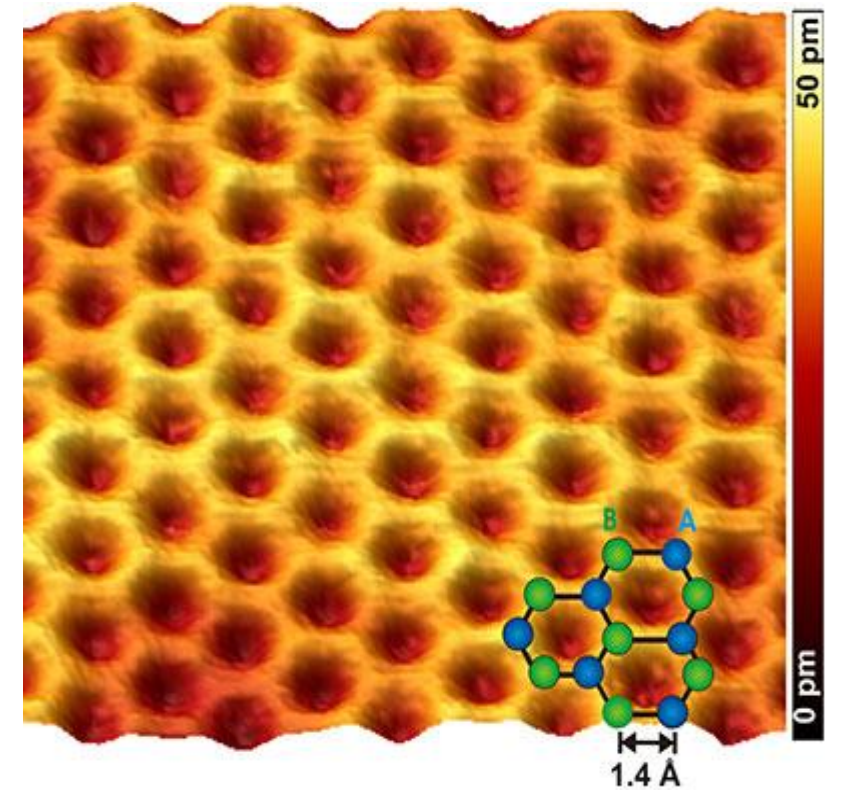
Kuantum Tünelleme Örnekleri

Elektron Tünelleme Mikroskobu (STM)



(Binnig & Rohrer, 1986 Nobel Ödülü)

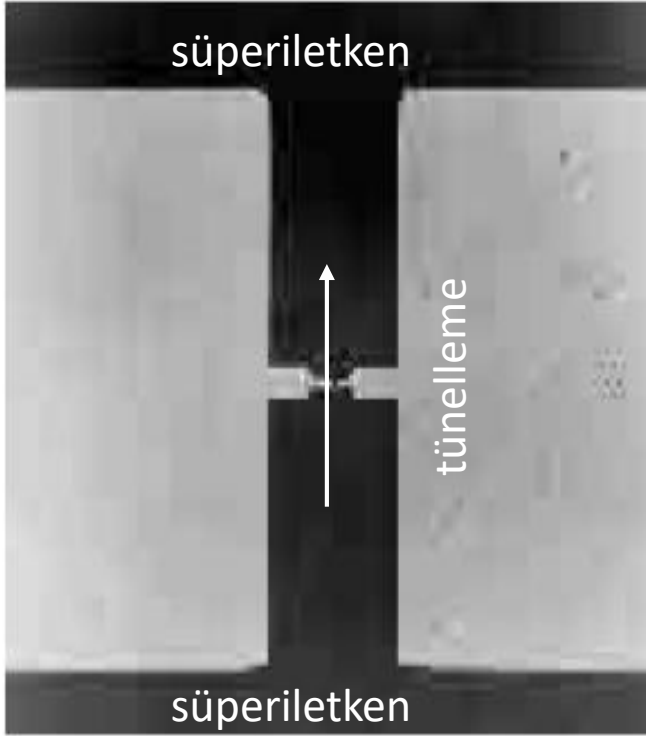
(<http://www.nanoscience.de>)



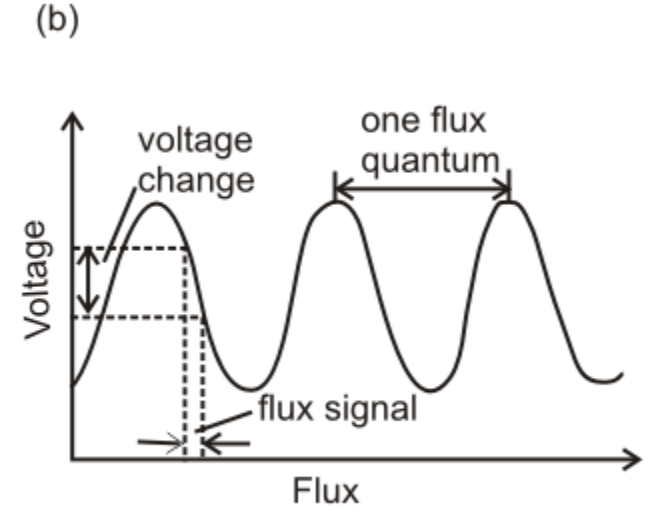
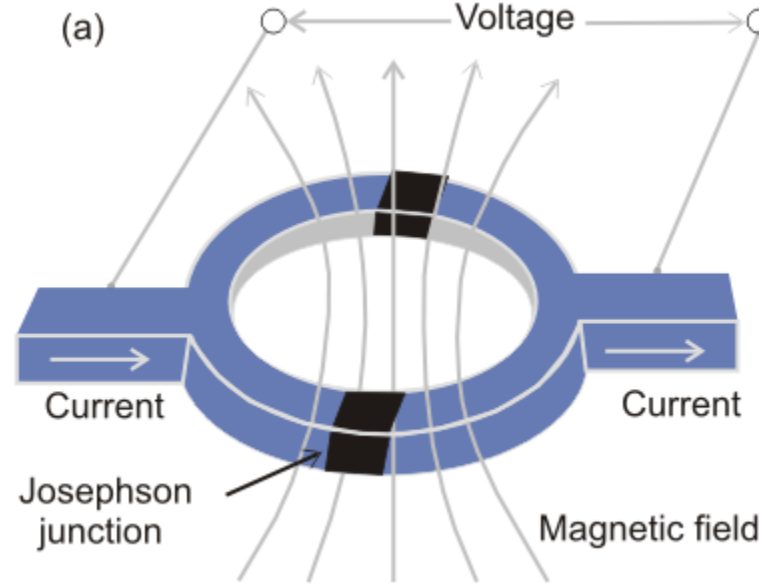
(Grafen yüzeyi, $I_{\text{tün}} = 10 \text{ pA}$)

Josephson Etkisi ve SQUIDS

(<http://www.phy-astr.gsu.edu/>)



(B. Josephson, Nobel Ödülü 1975)

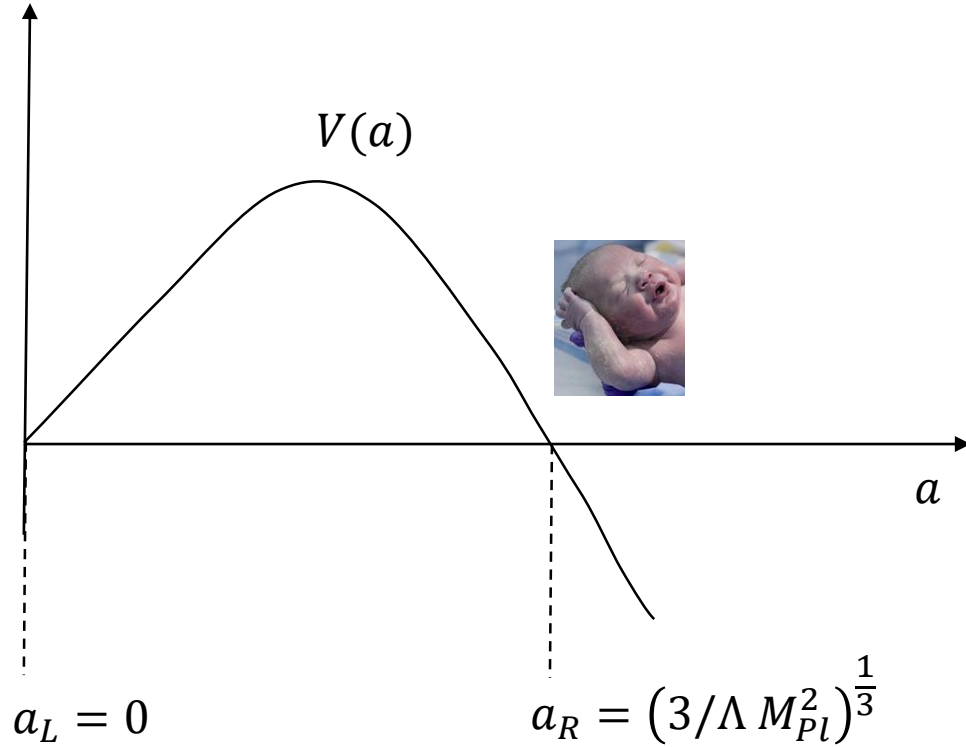


SQUIDS : 10^{-14} Tesla hassasiyet ile manyetik alan ölçümü

kalpte: 10^{-10} Tesla

beyinde: 10^{-13} Tesla

Evrenin Oluşumu



Evrenin oluşumu esasen M_{Pl} kütleli ve $E = 0$ enerjili bir parçacığın şu potansiyelden tünellemesidir

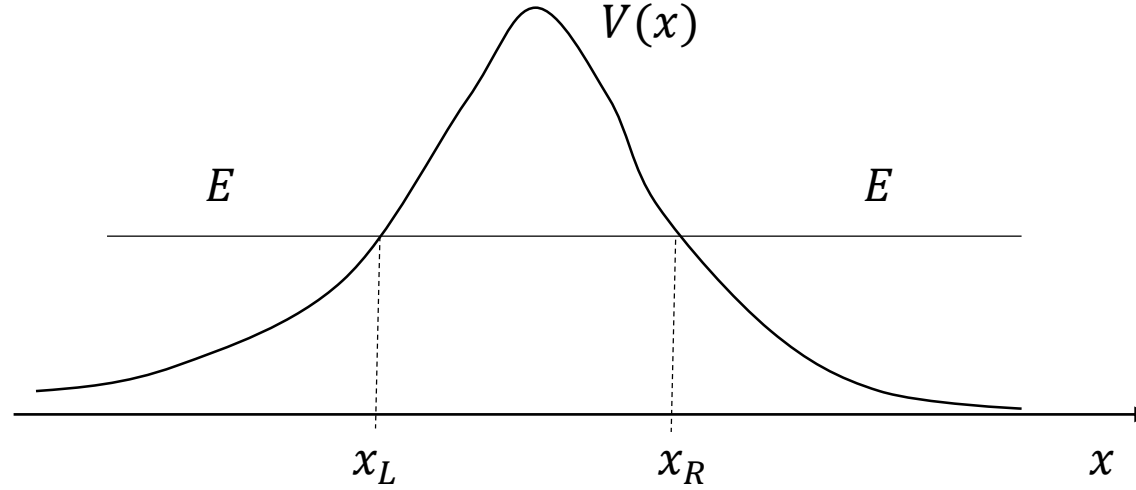
$$V(a) = \frac{9 \pi^2 M_{Pl}^2 a}{8} \left(1 - \frac{\Lambda M_{Pl}^2 a^3}{3} \right)$$

öyle ki Λ kozmojik sabittir.

$$M_{Pl} = (8\pi G_N)^{-\frac{1}{2}}$$

Kuantum Tünelleme Zamanı

Tünelleme Zamanı



Tünelleme Zamanı = parçacığın x_L den x_R noktasında ulaşması için geçen zaman

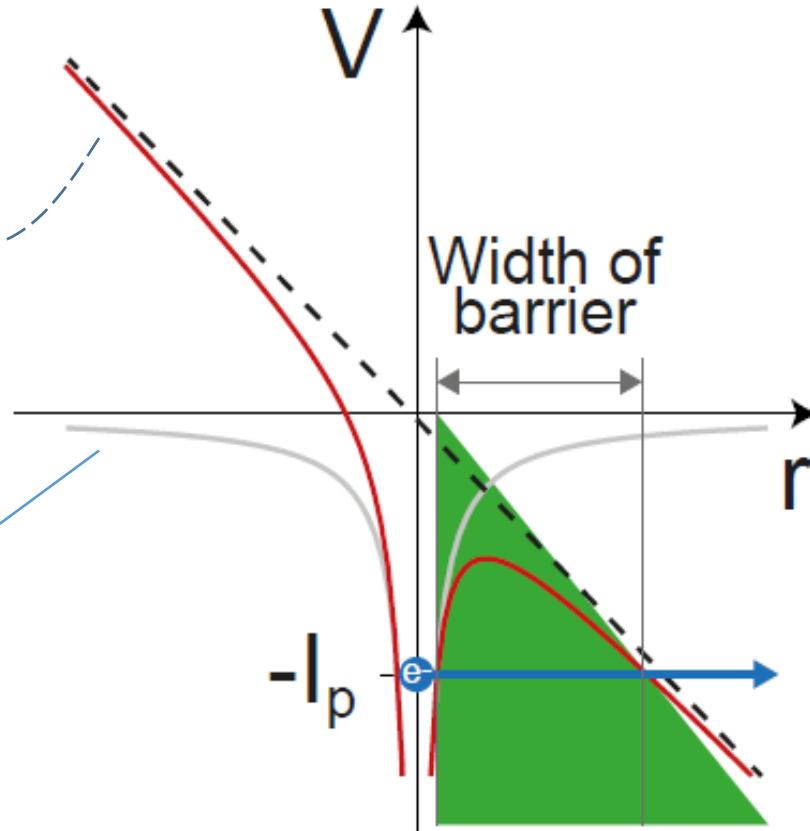
Deney: Ölçümler mevcut!

Kuram: Tünelleme zamanını bilemeyiz/hesaplayamayız
(Zaman kuantum kuramında bir gözlenebilen değildir)

Deneyleme Ortamı

$$V_{laser}(r) = (-e) \times (-\vec{r} \cdot \vec{\mathcal{E}})$$

$$V_{coul}(r) \propto -1/r$$



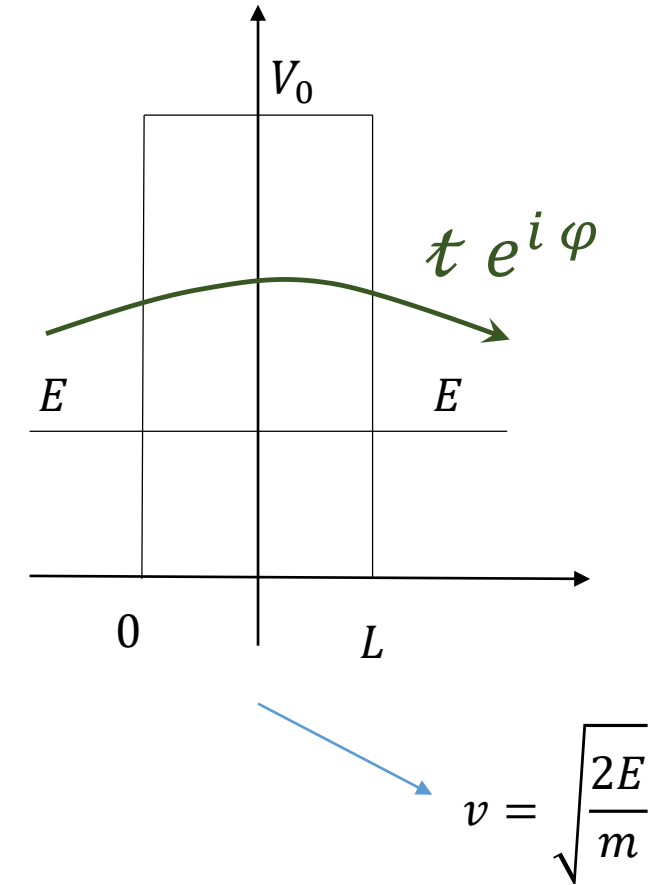
$$\text{Tünelleme iyonizasyonu: } \gamma = \frac{\sqrt{I_p} \omega}{\mathcal{E}} \approx 1$$

- ω = lazer frekansı
- \mathcal{E} = elektrik alanın tepe değeri

(A. Landsman et al, Optica 1 (2016) 343)

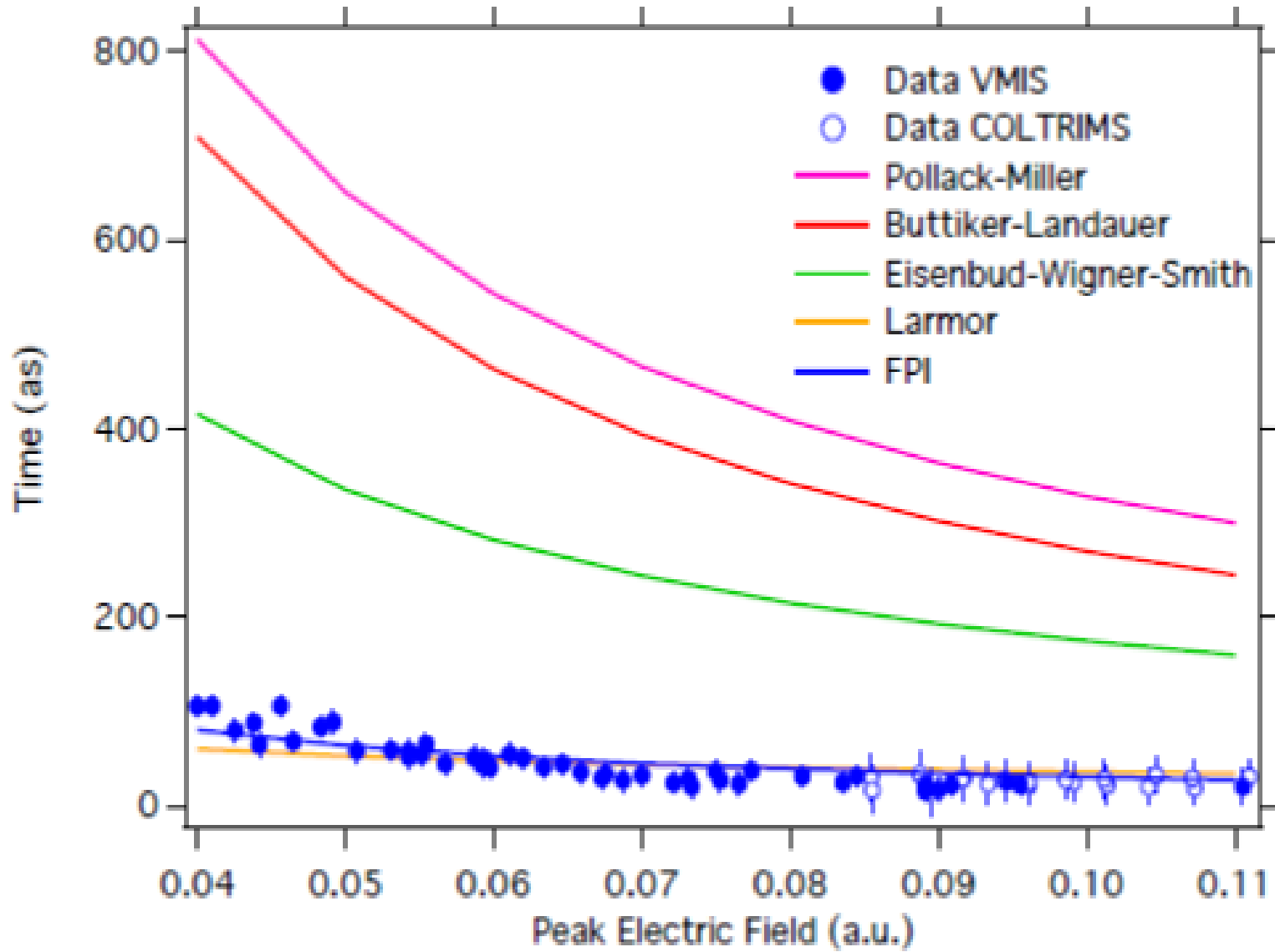
Bilinen Zaman Modelleri

Tünelleme Zaman Modeli	$L \rightarrow \infty$	$\hbar \rightarrow 0$
$(\Delta t)_{BL} = -\hbar \frac{\partial \ln \tau}{\partial V_0}$	$\frac{\hbar}{V_0} \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}$ / ∞	0 / ∞
$(\Delta t)_{LM} = -\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial V_0}$	$\frac{\hbar}{V_0} \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}$ / ∞	0 / ∞
$(\Delta t)_{PM} = +\hbar \frac{\partial \ln \tau}{\partial E}$	$\frac{\hbar}{E} \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}$ / ∞	0 / ∞
$(\Delta t)_{EW} = +\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial E} + \frac{L}{v}$	∞ (elle ekleme)	$\frac{L}{v}$ / ∞



temel fizikle uyumsuz sonuçlar

Model-Deney Karşılaştırması



bilinen tüm «tünelleme zamanı» modelleri deney tarafından dışlanmış durumda

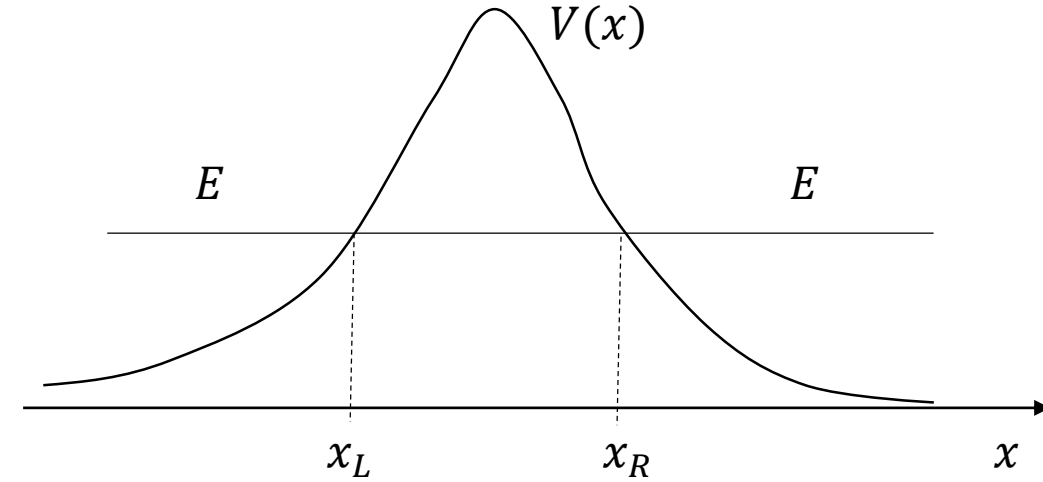
$(\Delta t)_{LM} = \text{Re}\{(\Delta t)_{FPI}\}$ ve $|(\Delta t)_{FPI}|$ deneye uyar zira öyle kalibre edildiler.

Entropik Tünelleme Zamanı

Parçacıksal Dinamik

- Enerjinin korunumu momentumu belirler:

$$\frac{p^2}{2m} + V(x) = E \Rightarrow p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$$



- Bariyer altında ($x_L < x < x_R$) momentum tamamiyle sanaldır ($i = \sqrt{-1}$):

$$\sqrt{2m(E - V(x))} = i \sqrt{2m(V(x) - E)} \Rightarrow \wp(x) \equiv \sqrt{2m(V(x) - E)}$$

- Bariyeri katetmek için geçen klasik zaman da tamamiyle sanaldır:

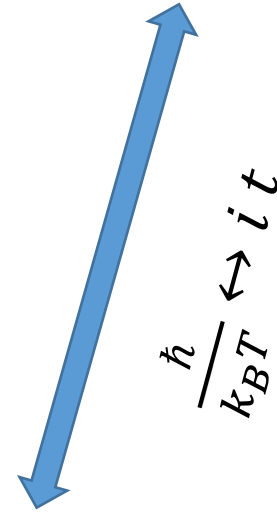
$$\int_{x_L}^{x_R} \frac{m dx}{p(x)} = \int_{x_L}^{x_R} \frac{m dx}{i \wp(x)} \Rightarrow \tau_c \equiv \int_{x_L}^{x_R} \frac{m dx}{\sqrt{2m(V(x) - E)}}$$

İstatistiksel Resim

- Sanal zaman \Leftrightarrow Sıcaklık

- Propagatörler \Leftrightarrow Partisyon fonksiyonları

$$\text{KM: } U = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$



$$\text{SM: } Z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{k_B T}}$$

Entropi

(Kuantum) salınımlarının sahip olduğu enerji = $T S$

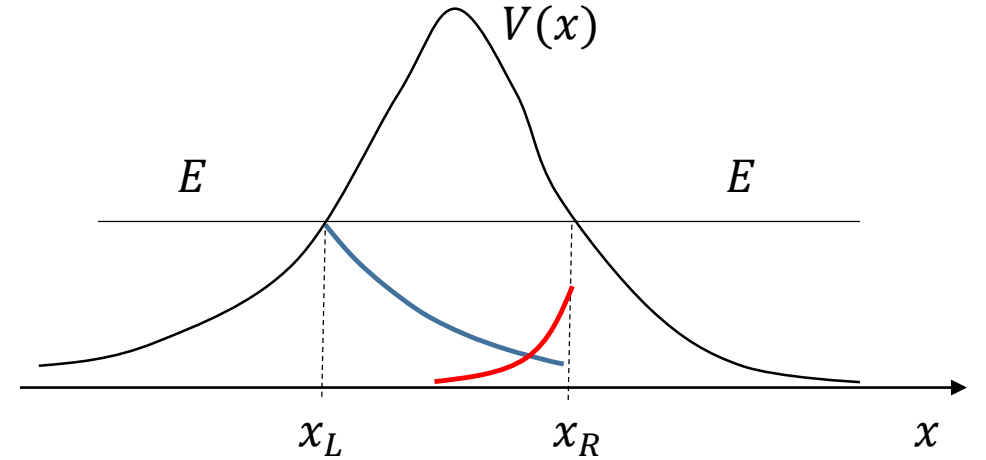
➤ Sıcaklık = $T = \frac{\hbar}{k_B \tau_c}$

➤ Entropi = $S = -k_B P \log P$

➤ Olasılık = $P_r = \int_{x_L}^{x_R} dx \psi^*(x) \psi(x)$

➤ Dalga fonksiyonu = $\psi(x) = c_R e^{-\phi(x)} + c_L e^{\phi(x)}$

➤ Zayıflatıcı faz = $\phi(x) = \frac{1}{\hbar} \int_{x_L}^x \wp(x) dx = \frac{1}{\hbar} \int_{x_L}^x \sqrt{2m (V(x) - E)} dx$



Entropik Tünelleme Zamanı

$$(\Delta t)_{ETT} \equiv \frac{\hbar}{TS} = - \frac{\tau_c}{P_r \log P_r}$$

enerji-zaman belirsizlik ilişkisi
parçacın korunan (sabit) enerjisi E
için değil kuantum salınımlarında
biriken enerji TS için uygulanıyor

$(\Delta t)_{ETT} \rightarrow 0$ as $\hbar \rightarrow 0$

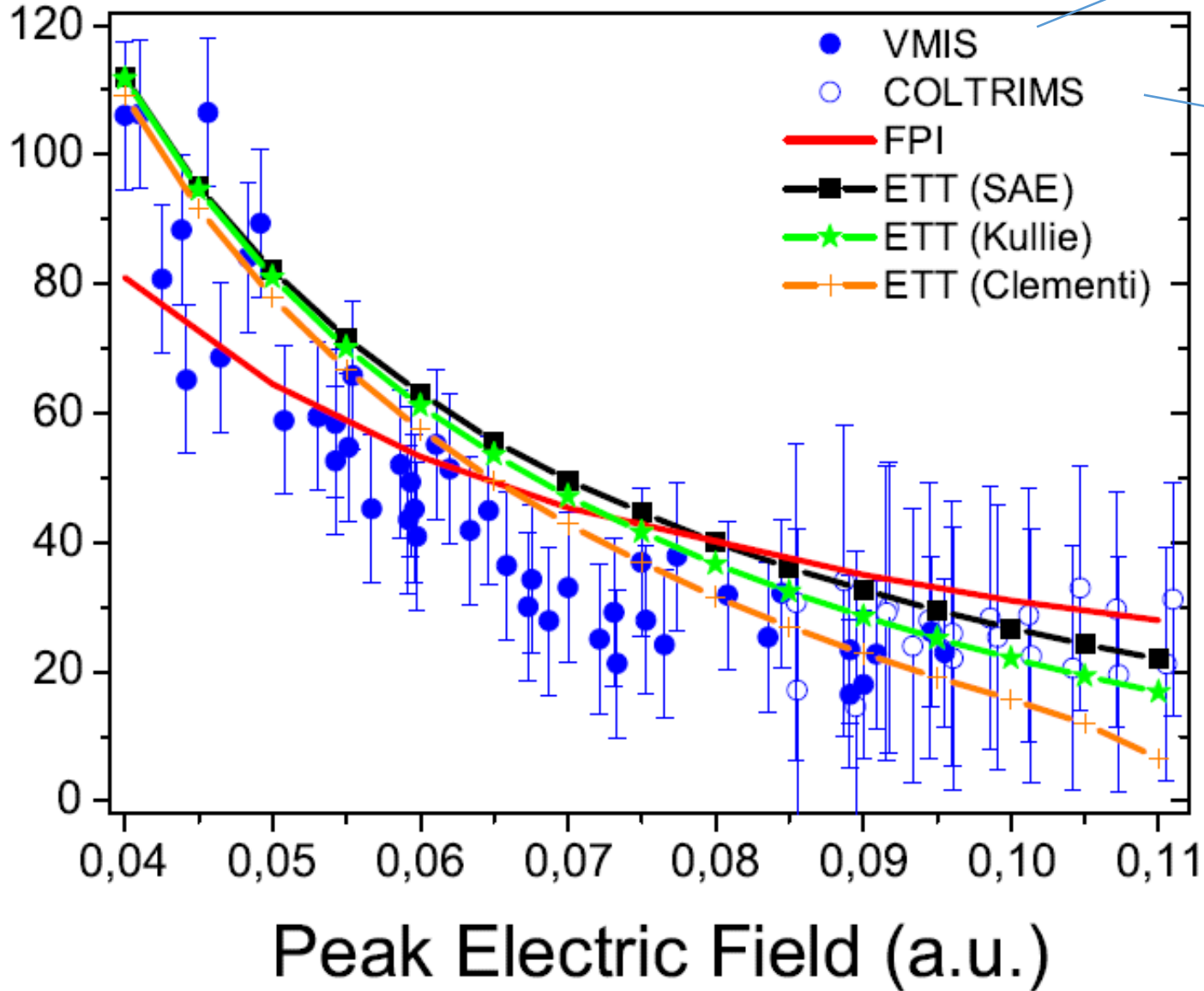
(classically tunneling is impossible)

Bekleme (dwell) zamanı (dışarıda sıfır potansiyel):

$$(\Delta t)_D = \frac{mP_r}{\sqrt{2mE}}$$

(D. D, T. Guner, *Annals of Physics*, 386 (2017) 291)

ETT'nin Deneysel Testi

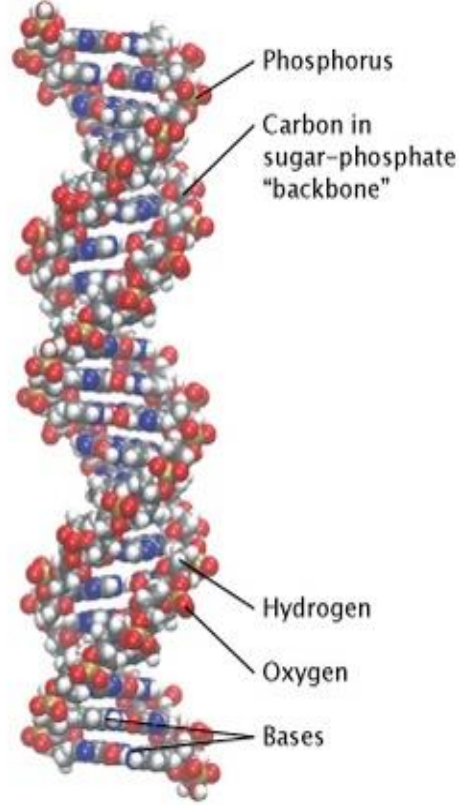
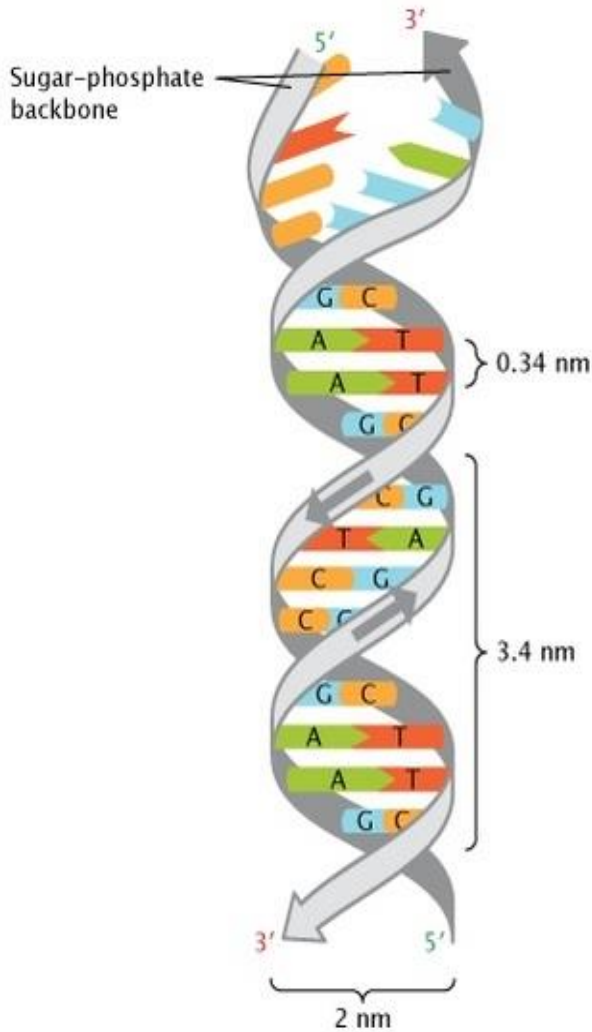


Hız Dönüşüm Spektrometresi (VMIS)

Sıçrama Momentumu Spektrometresi (COLTRIMS)

(A. Landsman et al, Optica 1 (2016) 343)

DNA Nokta Mutasyonlarında Gecikme Zamanı



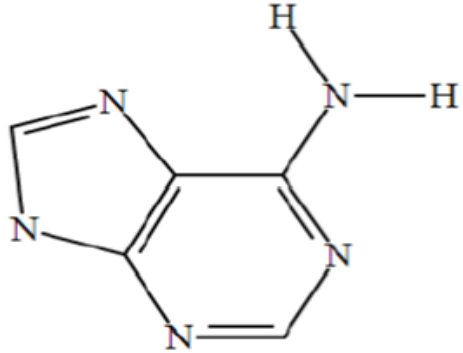
A: Adenine T: Thymine

C: Cytosine G: Guanine

- Nokta Mutasyon: DNA'daki A, T, C ve G aminoasitlerin her birinin deđişime uğraması (veya eklenip silinmesi).
- Moleküler boyut kabaca 1 Angstorm alınabilir.
- A ve G bir tarafta, T ve C diđer tarafta yer alır.

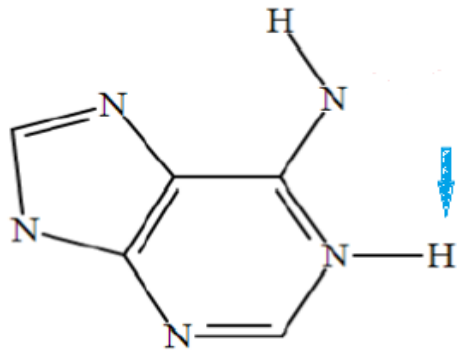
DNA çift-sarmalı (Nature Education'dan alındı)

DNA Mutasyonu

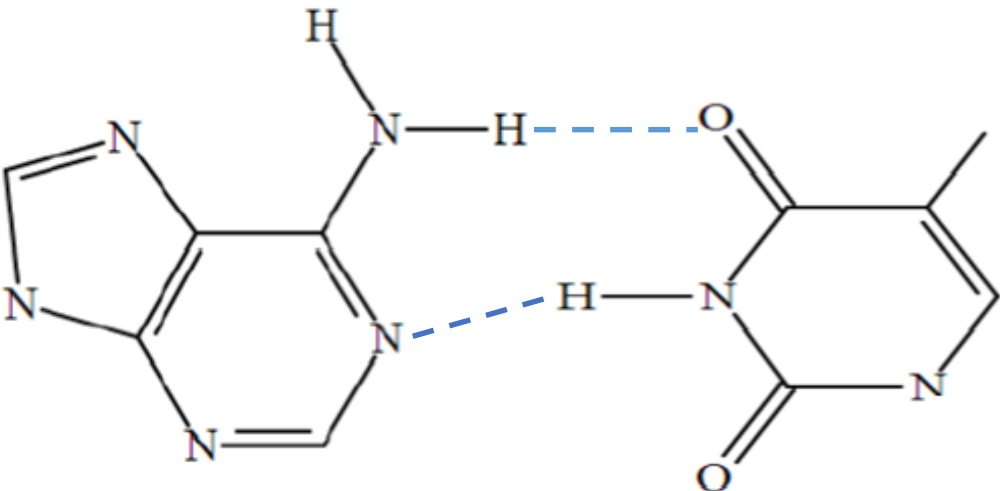


Adenine

proton tünellemesi
 →



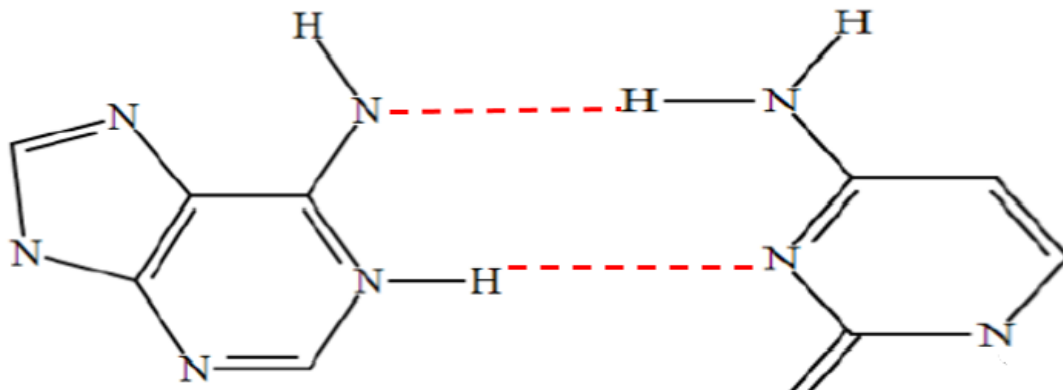
Adenine*



Adenine

Thymine

A		C
T		G

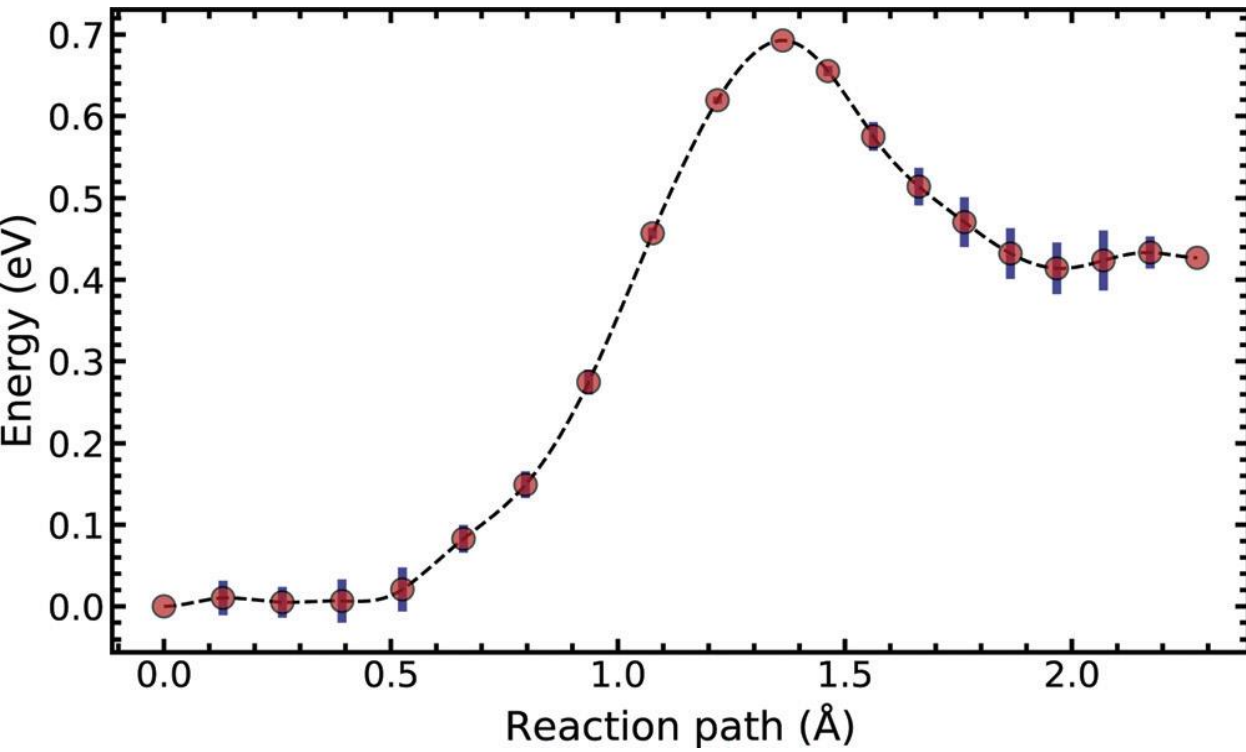


Adenine*

Cytosine

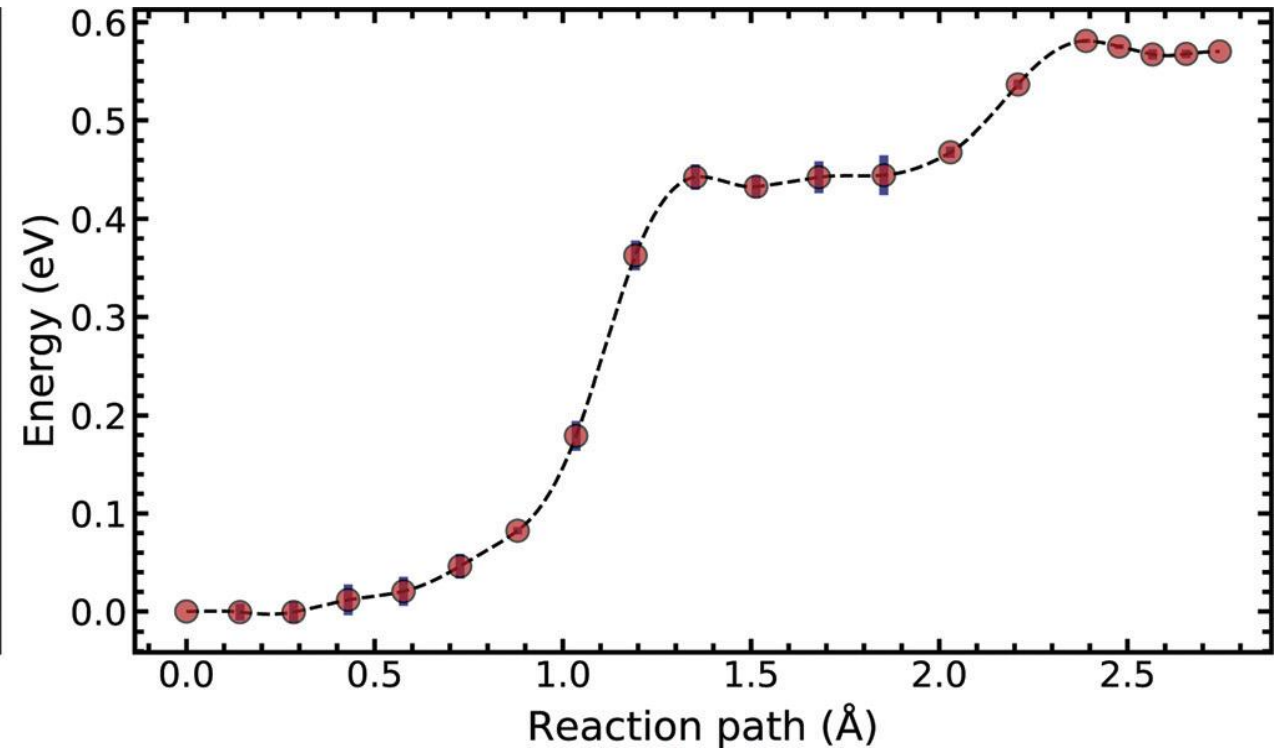
A*	—	C
T	—	G*

(P. Löwdin, Rev. Mod. Phys. 35 (1963) 724)



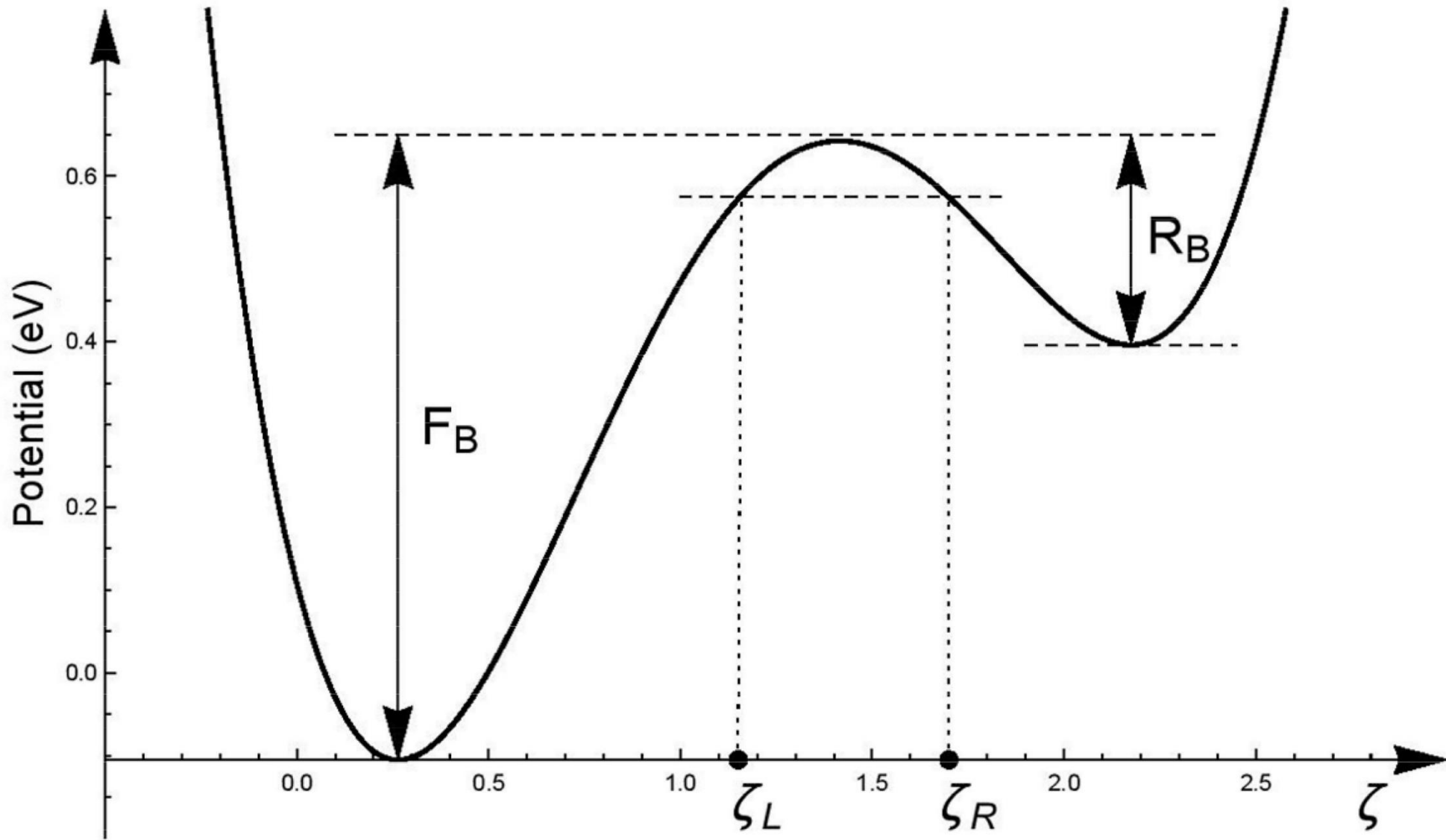
(G-C / G*-C* potansiyel yüzeyi)

(tünelleme gerekli)



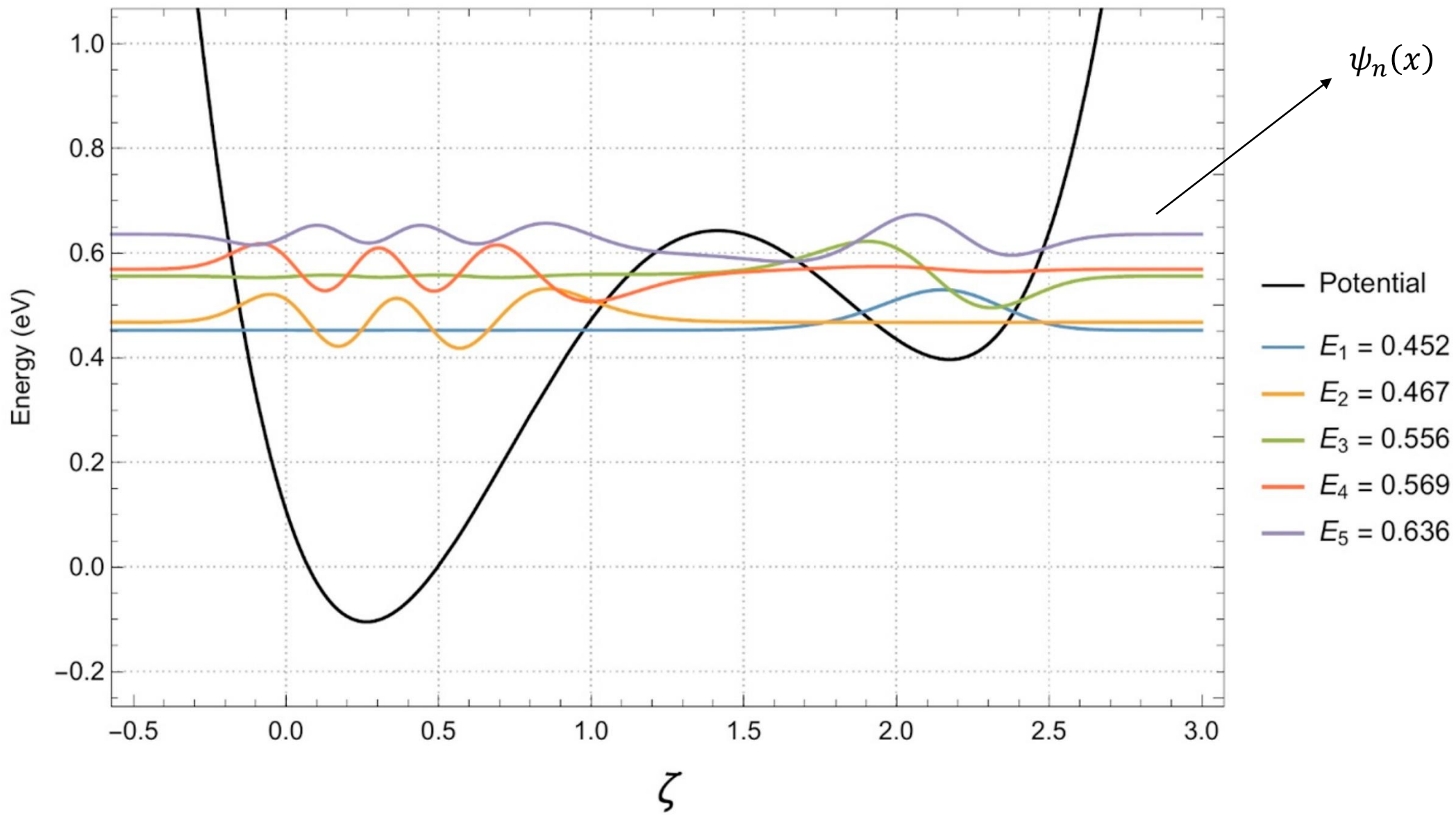
(A-T / A*-T* potansiyel yüzeyi)

(tünelleme yok)



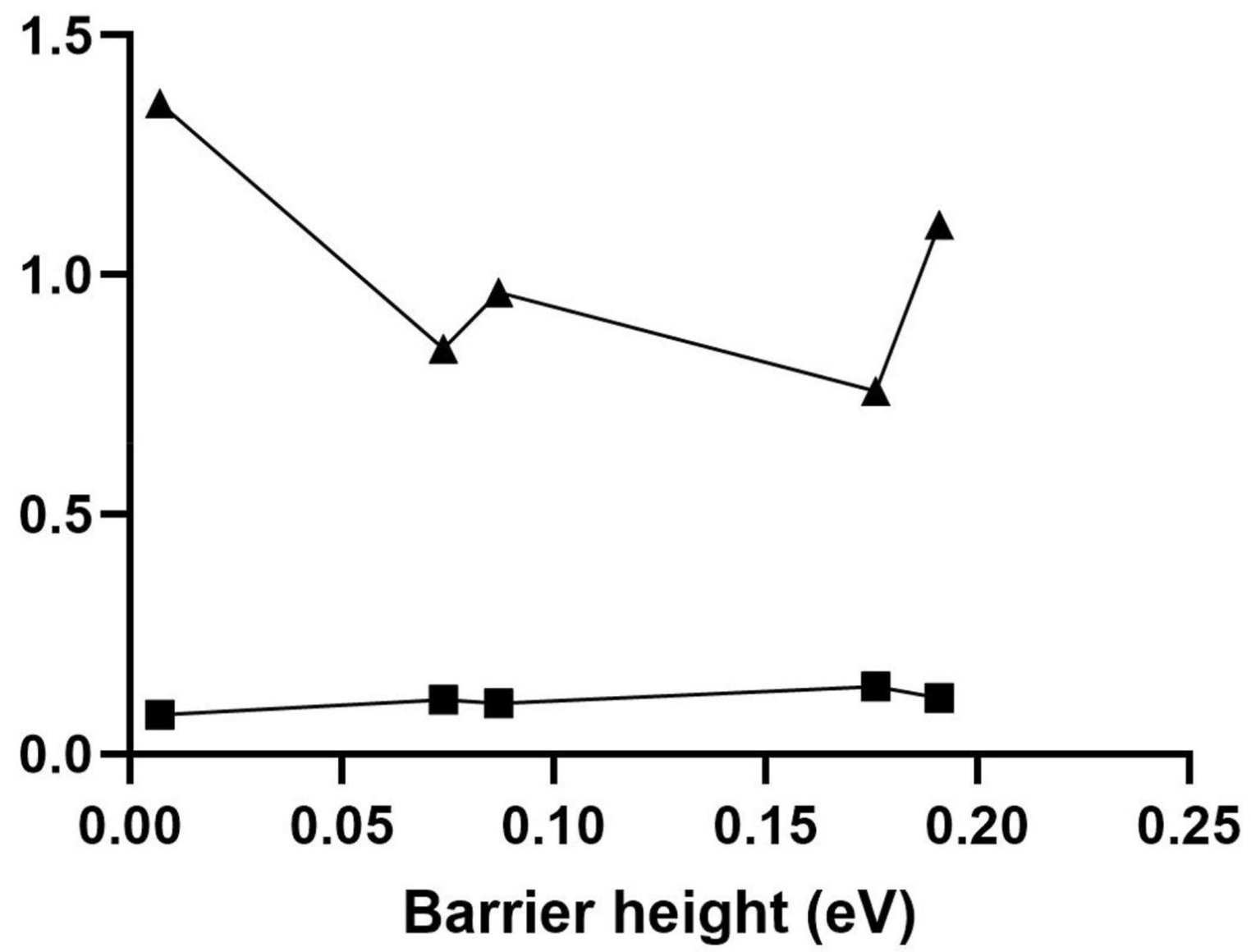
G-C / G*-C* potansiyel yüzey)

$$V(\zeta) = 0.1081 - 1.7923 \zeta + 4.437 \zeta^2 - 2.8316 \zeta^3 + 0.551 \zeta^4 \quad [\text{eV}]$$



Schrödinger Denklemi:
$$-\frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{d^2\psi_n(\zeta)}{d\zeta^2} + V(\zeta)\psi_n(\zeta) = E_n\psi_n(\zeta)$$

Time Delays of Proton Tunneling



- Entropic Time (ps)
- ▲ Dwell Time (fs)

- Bekleme (dwell) zamanı G-C/G*-C* potansiyel yüzeyi için uygun değildir ancak bir yaklaşık değer olarak tutulmuştur.
- Entropik zamanın ilginç özellikler sergilemektedir.
 - Entropik zaman biyolojik sistemlerdeki moleküler geçiş zamanları ile uyumludur. (Lépine vd. 2013).
 - Entropik zaman bariyer yüksekliği azalınca kısalmaktadır ki bu fiziksel bir özelliktir.
 - Entropik zaman gereğince DNA'nın mutasyonlarının oluşması için protonun yaptığı geçiş kabaca pikosanyelik gecikme ile olmaktadır.
 - DNA nokta mutasyonlarının oluşumu mevcut femtosaniye lazerler ile olmasa bile attosaniye lazerler ile incelenip anlaşılabilir.



Download

Progress in Biophysics and Molecular Biology

Available online 9 June 2021

In Press, Journal Pre-proof 

Time delay during the proton tunneling in the base pairs of the DNA double helix

Gizem Çelebi  , Elif Özçelik , Emre Vardar , Durmuş Demir 

Show more 

 Outline

 Share

 Cite

<https://doi.org/10.1016/j.pbiomolbio.2021.06.001>

[Get rights and content](#)

Tezekkürler...