بیست و یکمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و هفتمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۲۳ تا ۲۵ دی ماه ۱۳۹۳، دانشگاه شهید بهشتی

تأثیر نوفه‌های تصادفی *غیرمارکوف* بر درهم‌تنیدگی کوانتومی در یک ساختار فوتوسنتز دوتایی

مریم صابری[۱]، رسول رکنی‌زاده[۲] و مالک باقری هارونی[۲]

دانشگاه شهید بهشتی، دانشکده فیزیک، تهران، ایران[۱]

دانشگاه اصفهان، گروه فیزیک، گروه پژوهشی اپتیک کوانتومی، اصفهان، ایران[۲]

چکیده – در این مقاله، رویکرد تحلیلی جدیدی برای بررسی دینامیک انتقال انرژی برانگیختگی و درهم‌تنیدگی کوانتومی در یک ساختار فوتوسنتز متشکل از دو رنگدانه ارائه شده است. در این رویکرد، محیط پروتئینی اطراف هر مولکول رنگدانه به شکل نوفه‌ی تصادفی غیرمارکوف مدل‌بندی شده است. عبارات تحلیلی دقیقی برای جمعیت هرکدام از مولکول‌های رنگدانه و درهم تنیدگی کوانتومی آن‌ها محاسبه شده است. نتایج عددی به دست آمده تطبیق خوبی با نتایج تجربی در حد دماهای آزمایشگاه و فیزیولوژیک نشان می‌دهد.

کلید واژه- انتقال انرژی برانگیختگی، درهم تنیدگی کوانتومی، ساختارهای پیچیده رنگدانه-پروتئین، سامانه فوتوسنتز دوتایی.

Influence of non-Markovian Stochastic Noises on Dynamics of Quantum Entanglement in a Photosynthetic Dimer System

Maryam Saberi, Rasoul Roknizadeh, and Malek Bagheri Harouni

Faculty of Physics, Shahid Beheshti University, G. C., Evin, 19839-63113 Tehran, Iran

Department of Physics, Quantum Optics Group, University of Isfahan, 81746 Isfahan, Iran

Abstract- In this work, an exact analytical approach for the dynamics of excitation energy transfer and quantum entanglement in a photosynthetic dimer system is presented. In this approach, the protein environment is investigated as non-Markovian stochastic noise around each pigment molecule. The exact analytical expressions for the population of two pigments and their quantum entanglement is obtained. It is shown that numerical results have a good matching with the experimental results at cryogenic and physiological temperatures.

Keywords: Excitation energy transfer, quantum entanglement, Pigment-protein complex system, photosynthetic dimer system.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

۱- مقدمه

فوتوسنتز یکی از پدیده‌های بیولوژیکی است که برای توصیف آن با توجه به ابعاد نانو و زیر نانومتری سامانه فوتوسنتز کننده باید از مفاهیم مکانیک کوانتومی بهره برد. انتقال انرژی برانگیختگی یکی از مراحل این پدیده است که در سامانه‌های پیچیده‌ی رنگدانه-پروتئین انجام می‌شود [۱]. در این مرحله فوتون توسط آنتن‌های دریافت کننده‌ی انرژی جذب و انرژی آن به صورت انرژی برانگیختگی در بین مولکول‌های رنگدانه منتقل شده و با بهره‌ی کوانتومی نزدیک به یک به مرکز واکنش‌های شیمیایی می‌رسد [۲-۴]. این ویژگی اهمیت مطالعات نظری این پدیده را در جهت ارتقا و افزایش بهره‌ی ادوات اپتیکی نشان می‌دهد. هم‌چنین این ساختارهای طبیعی چند-ذره‌ایی ابزار مناسبی جهت اندازه‌گیری استاندارد هم‌بستگی و درهم‌تنیدگی کوانتومی به حساب می‌آیند [۵]. در یک سامانه کوانتومی در برهم‌کنش با محیط، محیط نقش اتلافگر را دارد، اما سامانه‌های زیستی این انگیزه را ایجاد می‌کنند که محیط می‌تواند نقش کمک کننده در ایجاد زمان همدوسی بیشتر را داشته باشد [۶]. دراین سامانه‌های زیستی قدرت جفت‌شدگی الکترونی مولکول‌های رنگدانه و قدرت جفت‌شدگی رنگدانه-محیط مشابه هستند و از این‌رو روش‌های تقریبی که تاکنون به کار گرفته شده‌اند [۷-۸] کاربرد چندانی در توصیف واقعی این پدیده ندارند. لذا لازم است الگوسازی محیط به گونه-ایی انجام شود تا به حل دقیقی برای توصیف دینامیک انتقال انرژی و درهم‌تنیدگی کوانتومی در این ساختارها دست پیدا کنیم.

در رهیافت تحلیلی این مقاله، ساختار فوتوسنتز متشکل از دو مولکول رنگدانه لحاظ می‌شود. مولکول‌های رنگدانه با جایگاه‌های دو ترازی که به صورت الکترونی با یکدیگر جفت شده‌اند توصیف می‌شوند. نقش محیط پروتئینی اطراف رنگدانه‌ها نیز با نوفه‌های تصادفی غیرمارکوف جای‌گزین می‌شود [۹]. رهیافت ارائه شده به ما کمک می‌کند تا بتوان علاوه بر مطالعه‌ی دینامیک انتقال انرژی برانگیختگی، دینامیک درهم‌تنیدگی کوانتومی رنگدانه‌ها را به طور دقیق مطالعه کرد.

در بخش اول این مقاله فرمول‌بندی رهیافت ارائه شده و عبارات تحلیلی برای جمعیت هر کدام از مولکول‌های رنگدانه و همدوسی آن‌ها به دست آمده است. در بخش دوم، نتایج تحلیلی بخش اول ارائه گردیده است و با نتایج تجربی در دو حد دمای بالا و پایین مقایسه می‌شوند.

۲- الگوی نظری

در این بخش دینامیک درهم‌تنیدگی کوانتومی در انتقال تک برانگیختگی الکترونی در یک ساختار فوتوسنتز کننده با دو جایگاه جفت‌شده‌ی الکترونی در برهم‌کنش با محیط پروتئینی که به عنوان منبع تولید نوفه‌های تصادفی در نظر گرفته می‌شود، فرمول‌بندی می‌شود. هامیلتونی سامانه کل $H = H_e + H_{sto-noise}$ شامل دو بخش H_e الکترونی و $H_{sto-noise}$ نوفه‌ی تصادفی است که به صورت زیر در نظر گرفته می‌شوند ($\hbar = 1$):

$$H_e = \sum_{i \neq j=1}^{2} \left(\varepsilon_i |i\rangle\langle i| + J\left(|i\rangle\langle j| + h.c.\right)\right),$$
$$H_{sto-noise} = \sum_{i=1}^{2} \xi_i(t) |i\rangle\langle i|. \quad (1)$$

در اینجا $|1\rangle$ ($|2\rangle$) معرف حالتی است که جایگاه اول (دوم) برانگیخته و جایگاه دوم (اول) در حالت زمینه باشد. ε_1 (ε_2) انرژی برانگیختگی جایگاه اول (دوم) و J قدرت جفت‌شدگی الکترونی بین دو جایگاه مولکولی است. $\xi_i(t)$ نیز نماینده‌ی نوفه‌ی تصادفی خارجی است. فرض کرده‌ایم نوفه‌ی القا شده به هر مولکول رنگدانه مستقل از دیگری باشد. هر نوفه‌ی تصادفی با مقدار میانگین $\langle \xi_i(t) \rangle = 0$ و تابع هم‌بستگی $\langle \xi_i(t_1) \xi_j(t_2) \rangle = \delta_{ij} K_{ij}$ مشخص می‌شود. برای مشخص شدن دینامیک جمعیت و همدوسی مولکول‌های رنگدانه از معادله لیوویل $\frac{\partial \rho}{\partial t} = i\left[\rho, H\right]$ استفاده می-شود. به منظور به دست آوردن سهم زیرسامانه‌ی الکترونی مولکول‌های رنگدانه در ماتریس چگالی کل لازم است یک میانگین‌گیری تصادفی روی درجات آزادی نوفه- $\sigma_i = \langle \rho \rangle_{\xi_i}$ انجام شود و دراین راستا از رابطه‌ی نوویکوف [۱۰] استفاده می‌شود:

$$\langle \rho \xi_j(t) \rangle_{\xi_j} = \int_0^{\infty} K_j(t,t') \left\langle \frac{\delta \rho}{\delta \xi_j(t')} \right\rangle dt'. \quad (2)$$

به این ترتیب معادلات دینامیک جمعیت و همدوسی دو

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]

جایگاه الکترونی به شکل زیر حاصل می‌شوند:

$$\frac{d\sigma_{11}}{dt} = -2J\,\mathrm{Im}(\sigma_{12}),$$
$$\frac{d\sigma_{12}}{dt} = i(\varepsilon_2-\varepsilon_1)\sigma_{12} + iJ(2\sigma_{11}-1) \qquad (۳)$$
$$-\int_0^t dt'\sigma_{12}(t')(K_1+K_2)(t-t').$$

برای محاسبه دینامیک درهم‌تنیدگی در این ساختار از سنجه کوانتومی ساختارهای دوتایی استفاده می‌شود که به صورت

$$C(\sigma) = \max(0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4})$$

تعریف می‌شود. دراین رابطه λ_iها ویژه مقادیر ماتریس $\bar{\sigma} = \sigma(\sigma_y \otimes \sigma_y)^* \sigma(\sigma_y \otimes \sigma_y)$ در نظر گرفته می‌شوند و ماتریس σ مربوط به زیر-سامانه الکترونی دوتایی است که به شکل زیر در نظر گرفته می‌شود:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{11} & \sigma_{12} & 0 \\ 0 & \sigma_{21} & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \qquad (۴)$$

۳- نتایج عددی

در این بخش، نتایج عددی به دست آمده از رهیافت معرفی شده را برای سامانه‌ی فوتوسنتز کننده دوتایی، نشان می‌دهیم. برای ساده کردن محاسبات فرض کردیم تابع حافظه K_i برای نوفه‌ی تمام جایگاه‌ها یکسان است. همان‌طور که می‌دانیم وقتی مقیاس زمانی جفت‌شدگی سامانه-محیط در مقایسه با جفت‌شدگی الکترونی خیلی سریع باشد، دینامیک محیط مارکوفی است. از سوی دیگر، می‌دانیم که فونون‌ها زمان همبستگی کوچکی دارند و محیط غیرمارکوفی به شمار می‌رود. بنابراین در اینجا تابع هم‌بستگی فونون‌ها را در شرایط فوتوسنتز به عنوان تابع هم‌بستگی زمانی نوفه‌های غیر مارکوفی به کار می‌بریم:

$$K_i = \int_0^\infty d\omega \frac{J_i(\omega)}{\omega^2} \begin{bmatrix} \coth(\frac{\beta\omega}{2})\cos(\omega t) \\ -i\sin(\omega t) \end{bmatrix} \qquad (۵)$$

با توجه به اینکه چگالی حالت براونی $J(\omega) = 2\lambda\gamma \frac{\omega}{\omega^2+\gamma^2}$ برای توصیف این‌گونه محیط-ها مناسب است به عنوان چگالی حالت محیط فونونی در نظر گرفته می‌شود. در این رابطه λ انرژی بازبهنجارش فونون‌ها و γ^{-1} معرف زمان همبستگی محیط فونونی است و بنابراین خواهیم داشت:

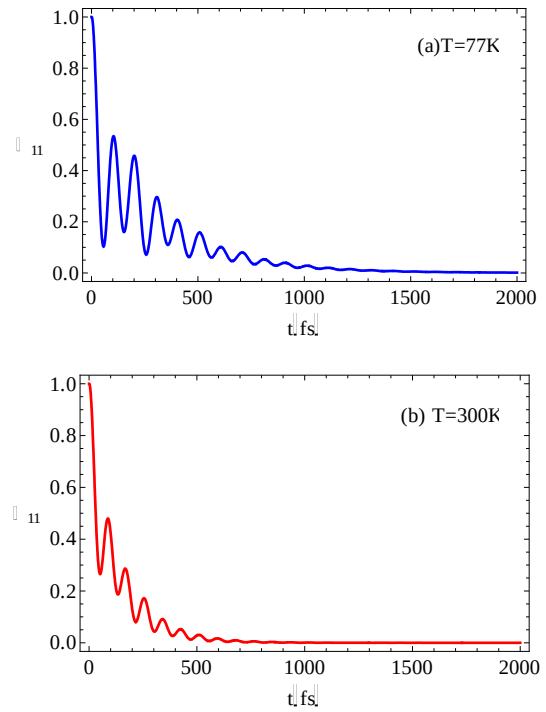
$$K_i(t) = \frac{2\lambda}{\beta} e^{-\gamma t} -$$
$$\frac{2\lambda}{\beta} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2\gamma}{\nu_k^2 - \gamma^2} (\gamma e^{-\gamma t} - \nu_k e^{-\nu_k t}). \qquad (6)$$

در اینجا ν_k فرکانس ماتسوبارا و $\beta=(kT)^{-1}$ است و در حد دماهای بالا تنها جمله اول لحاظ می‌شود. محاسبات عددی را برای گذار $1 \to 2$ پروتئین FMO با مشخصات $\varepsilon_1 = 120cm^{-1}$، $\varepsilon_2 = 0$، $J = -8\ \ 7\ \ \bar{c}^1$، $\lambda = 35cm^{-1}$ و $\gamma^{-1} = 100\,fs$ انجام می‌دهیم.

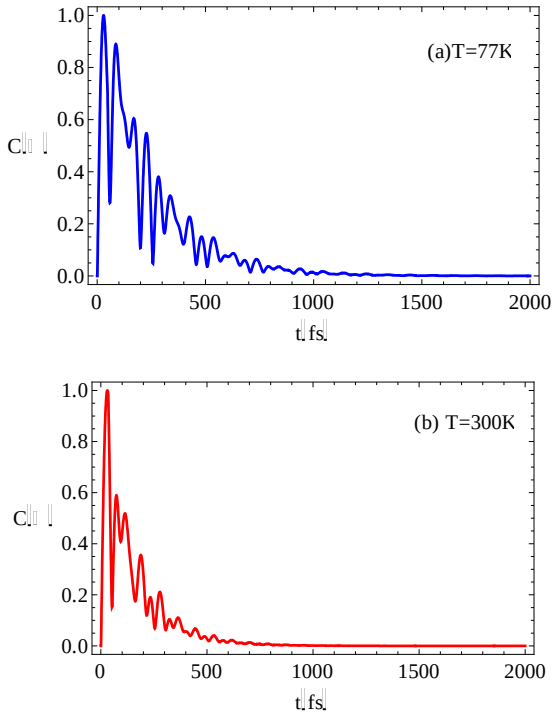
شکل (۱) اثر دمای محیط بر تحول زمانی جمعیت مولکول اول را نشان می‌دهد. زمان همدوسی در شکل (۱a) $1000\,fs$ به ازای دمای $77K$ و $600\,fs$ به ازای دمای $300K$ محاسبه شده است. نتایج تجربی به دست آمده برای این گذار ساختار پروتئینی FMO به ترتیب برابر مقادیر $700\,fs$ و $450\,fs$ برای دماهای $77K$ و $300K$ گزارش شده‌اند [۳-۴]. بنابراین باتقریب نسبتا خوبی می‌توان نوفه‌های غیرمارکوف را گزینه‌ی مناسبی جهت توصیف محیط پروتئینی در ساختارهای پیچیده فوتوسنتز دانست.

شکل (۲) اثر دمای محیط بر تحول زمانی درهم‌تنیدگی کوانتومی دو مولکول رنگدانه نشان می‌دهد. همان‌طور که در دو شکل (۲a) و (۲b) می‌بینیم بیشترین مقدار درهم-تنیدگی در $400\,fs$ اولیه برای هر دو دما رخ می‌دهد و با مرور زمان کاهش یافته تا به صفر یا مقدار اولیه می-رسد. بنابراین بعد از مدت زمان کوتاهی اکسیتون در جایگاه دوم جایگزیده می‌شود.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]



شکل ۱: تحول زمانی جمعیت جایگاه اول به ازای (a) دمای محیط T=77K و (b) ۳۰۰K



شکل ۲: تحول زمانی درهم‌تنیدگی کونتومی دو مولکول رنگدانه به ازای (a) دمای محیط T=77K و (b) ۳۰۰K

۴- نتیجه‌گیری

در روش مورد مطالعه در زمینه‌ی دینامیک درهم‌تنیدگی کوانتومی سامانه‌ی زیستی فوتوسنتزکننده دوتایی به عنوان سامانه‌ی باز کوانتومی رهیافت جدیدی به کار گرفته شد. در این روش اثر محیط پروتئینی را با نوفه‌های تصادفی غیرمارکوف جایگزین کردیم. با توجه به نتایج عددی به دست آمده و انطباق نسبتا خوب آن‌ها با نتایج تجربی در دو دمای آزمایشگاه و حد دمای فیزیولوژیکی، می‌توان نتیجه گرفت که نوفه‌های تصادفی غیرمارکوف گزینه‌ی مناسبی جهت توصیف محیط سامانه‌های پیچیده‌ی بیولوژیکی هستند.

مراجع

[1] Blankenship R. E, *Molecular Mechanisms of Photosynthesis*, world scientific, 2002.

[2] Engel G. S, Calhoun. T. R, Read. E. L, Fleming G. R, **Nature,** 446 (2007) 782.

[3] Collini E. Wong C. Y, Wilk K. E, Scholes G. D, **Nature** 463 (2010) 644.

[4] Lee H, Cheng Y. C, and Fleming G. R, **Science,** 316 (2007) 1462.

[5] Sarovar M., Ishizaki A., Fleming G. R. and Whaley K. B., *Quantum entanglement of photosynthetic light harvesting*, **Nat. Phys.** 6 (2010) 462.

[6] Breuer H. P, Petruccione F, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press, New York, 2002.

[7] Ishizaki A, Fleming G. R, **J. Chem. Phys**, 130 (2009) 234110; 130 (2009) 234111.

[8] Cheng Y. C, and Silbey R. J, **Phys. Rev. Lett,** 96 (2006) 028103; Mohseni M, Rebentrost P, Lloyd S, and Guzik A, **J. Chem. Phys,** 129 (2008) 174106; Plenio M, Huelga S, **New J. Phys,** 10 (2008) 113019.

[9] Ferialdi L, and Bassi A, **Phys. Rev. Lett,** 108 (2012) 170404.

[10] Novikov E. A, Eksp, Zh, **Teor. Fiz,** 47 (1964) 1919.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]