

اثرات درهمتنیدگی کوانتومی جهش توتومریک باز تیمین

سید محسن موسوی خوانساری^{*}، مهدی صادقی^۲

۱- استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آیت ا... بروجردی (ره)

۲- استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آیت ا... بروجردی (ره)

چکیده

اگر چه دنیای کوانتومی به طور معمول در محدوده نانومتری است، اما درهمتنیدگی کوانتومی در ساختارهای ماکروسکوپی با ابعاد میکرونی دیده شده اند. در این مقاله اثرات کوانتومی در ساختارهای زیستی مورد بحث قرار می‌گیرد. مفاهیم بنیادی مکانیک کوانتومی، به ویژه نظریه محاسبات و اطلاعات کوانتومی برای بررسی جهش توتومریک در باز تیمین استاندارد و درهمتنیدگی به وجود آمده در اثر این جهش برای باز تیمین جهش یافته با محاسبات دقیق به کار خواهند رفت. این محاسبات نشان داد که حالت کوانتومی باز تیمین استاندارد، یک حالت ضربی یا غیردرهمتنیده است در حالی که حالت کوانتومی باز تیمین جهش یافته، یک حالت با درهمتنیدگی جزئی است. از مهم ترین اثرات این درهمتنیدگی کوانتومی، ثبات و پایداری باز تیمین جهش یافته خواهد بود. با وجود اینکه احتمال وقوع این جهش توتومریک از مرتبه 10^{-5} تا 10^{-3} است، محاسبات انجام شده نشان داد که این حالت، به دلیل درهمتنیدگی ایجاد شده یک حالت پایدار و در واقع غیر قابل چشم پوشی در جهش های ژنتیکی به حساب آمده و باید اثرات این نوع جهش ها را در ساختارهای زیستی با اهمیت دانست.

کلمات کلیدی: درهمتنیدگی کوانتومی، جهش توتومریک، باز تیمین استاندارد، باز تیمین جهش یافته

۱. مقدمه

ترمودینامیک و اصول فیزیک آماری [۱] به طور وسیعی برای توصیف فرآیندهای مختلف در سلول ها استفاده می شوند [۲، ۳]. علاوه بر این، مفاهیم علوم کامپیوتر و ارتباطات نیز برای توصیف دینامیک درون و بین سلولی استفاده شده است. به تازگی مطالعات بیولوژیکی کوانتومی شتاب بیشتری به دست آورده است که می‌توان با توجه به تعداد انتشارات اخیر مرتبط با این موضوع قضاوت کرد [۴-۶]. آشکار شده است که مکانیک کوانتومی نقش مهمی در فتوسنتز، دریافت مغناطیسی و تکامل دارد. در فتوسنتز، مجموعه Fenna- Matthews-Olson (FMO) از انتقال منسجم تحریک الکترون در یک دوره زمانی کوتاه، پس از جذب فوتون، به مرکز واکنش که در آن انرژی به قند تبدیل می‌شود، پشتیبانی می‌کند. در مرحله دوم این تعامل، محیط دستگاه را جدا می‌کند که با اجتناب از گیر افتادن دستگاه در حالت‌های تاریک، انتقال

^{*} Corresponding author: Seyed Mohsen Moosavi Khansari
Email: m.moosavikhansari@abru.ac.ir

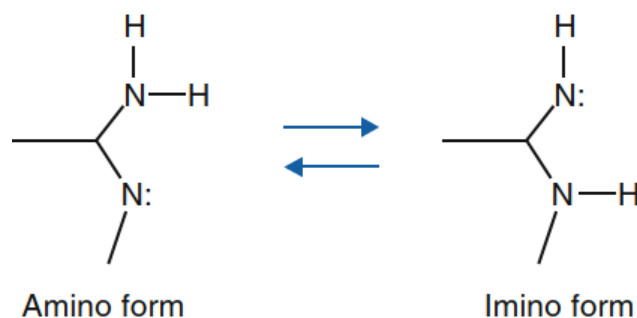
تحریک را سرعت می‌بخشد. علاوه بر این، همانندسازی DNA و سنتز پروتئین با استفاده از الگوریتم جستجوی گروور توصیف شده است. علاوه بر این، سازوکار مکانیکی کوانتومی برای تکامل بیولوژیکی در بررسی شده است. همچنین تلاش‌های زیادی برای توضیح ساختار کد ژنتیکی و انتقال اطلاعات از DNA به پروتئین با استفاده از مفاهیم مکانیک کوانتومی صورت گرفته است. به عنوان مثال، مدل مکانیکی کوانتومی عمومی برای توصیف انتقال اطلاعات از DNA به پروتئین با استفاده از نظریه اطلاعات کوانتومی توسط Karafyllidis ارائه شده است. با این حال، با توجه به پیچیدگی بالای مسئله، تعیین ظرفیت کانال بیولوژیکی کوانتومی هنوز یک مسئله باز است. از سوی دیگر، ظرفیت کانال بیولوژیکی کلاسیک توسط Yockey تعیین شده است. Yockey یک مدل کانال بیولوژیکی کلاسیک بدون حافظه گسسته ایجاد کرد و به صراحت احتمالات انتقالی را در میان اسیدهای آمینه استخراج کرد. یعنی، او انتقال اطلاعات از DNA به پروتئین را به عنوان یک مشکل ارتباطی نشان داد و ظرفیت کانال بیولوژیکی کلاسیک مربوطه را با به حداکثر رساندن اطلاعات متقابل بین DNA و پروتئین تعیین کرد. از سوی دیگر به اندازه کافی جالب توجه است که مقالات خاصی وجود دارد که نقش اطلاعات کوانتومی در فرآیندهای بیولوژیکی را زیر سوال می‌برد [۷].

۲. مباحث نظری

جهش‌های نقطه‌ای توسط اشکال توتومریک اسیدهای نوکلئیک ایجاد می‌شوند. دو شکل اصلی توتومریسم وجود

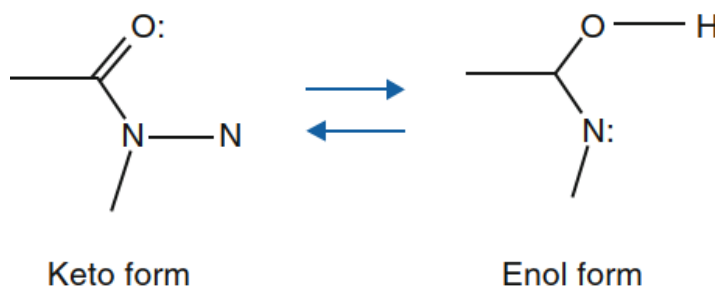
دارد:

(الف) آمینو-ایمینو توتومریسم که در شکل ۱ به تصویر کشیده شده است.



شکل ۱. توتومریسم آمینو-ایمینو

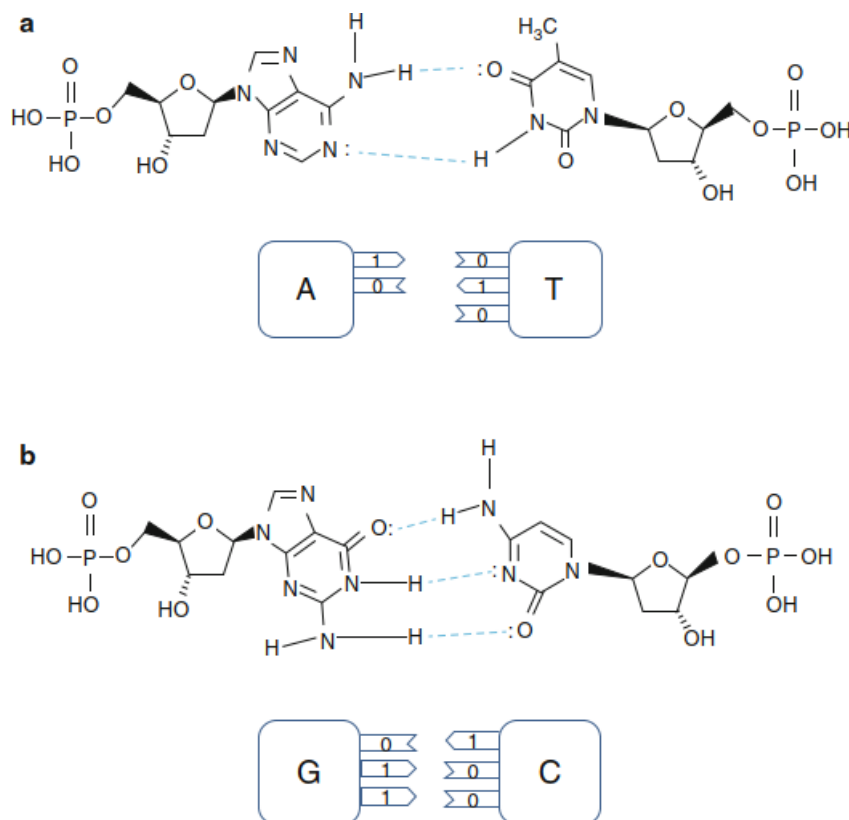
(ب) کتو-انول توتومریسم که در شکل ۲ به تصویر کشیده شده است.



شکل ۲. توتومریسم کتو-انول

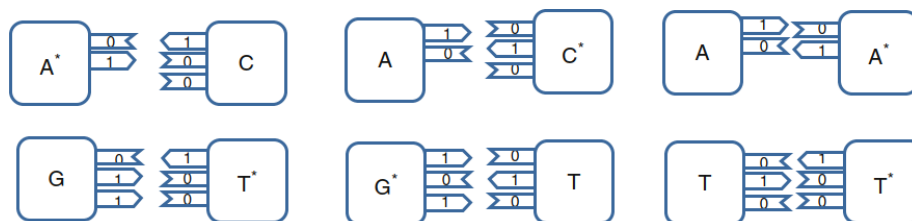
شکل‌های آمینو و کتو به عنوان شکل‌های استاندارد در نظر گرفته می‌شوند. نقطه‌های دوتایی (:)، در هر یک از اشکال توتومریسم، نشان‌دهنده جفت‌های تک‌الکترون است که می‌توانند پروتون (H^+) را جذب کنند و در تشکیل پیوند

هیدروژنی شرکت کنند. به عنوان مثال، جفت شدن نوکلئوتیدها برای ترکیبات $C = G$ و $T = A$ ، که در آن (-) نشان دهنده پیوند هیدروژنی است و در شکل ۳ مشاهده می‌شوند.



شکل ۳. جفت شدن اسیدهای نوکلئیک استاندارد، نماد 1 برای نشان دادن "دهنده" یک پروتون استفاده می‌شود در حالی که نماد 0 برای نشان دادن "پذیرنده" یک پروتون استفاده می‌شود.

در شکل ۳، همچنین الگووار اهداکننده های پروتون با نماد 1، در حالی که پذیرنده های پروتون با نماد 0 نشان داده می‌شوند، مشاهده می‌شوند. با این حال، در اشکال توتومریک A^* ، G^* ، C^* و T^* ، یک پروتون درگیر در پیوند هیدروژنی، از یک جفت تک الکترون به جفت الکترونی دیگر منتقل شده است که در شکل ۴ مشاهده می‌شوند.



شکل ۴. جفت شدن اسیدهای نوکلئیک توتومریک

در حین تکثیر یا ترجمه DNA، اسیدهای نوکلئیک توتومریک با اسیدهای نوکلئیک غیرکامل متصل می‌شوند و جهش‌ها را ایجاد می‌کنند. به عنوان نمونه، تومور A* به جای T به C متصل می‌شود (U در mRNA)، توتومر C* با A و توتومر G* با T (U) متصل شوند. همچنین ممکن است مطابق شکل ۵، هر دو باز در جفت DNA در اشکال توتومریک دیده شوند.



شکل ۵. هر دو باز در جفت DNA در اشکال توتومریک هستند.

به عنوان مثال، زمانی که DNA برای ذخیره‌سازی طولانی مدت اطلاعات ژنتیکی استفاده می‌شود، تونل زنی پروتون (ایجاد اشکال توتومریک) می‌تواند به معرفی خطاهای تصادفی کمک کند. احتمال وقوع اشکال اسیدهای نوکلئیک توتومریک خیلی کم است به طوری که منطقی است که اشتباهات وارد شده توسط این اشکال را تصادفی فرض کنیم. با این حال، وجود جهش‌زاهای سرطان‌زاهای تشعشعات الکترومغناطیسی و همچنین بمباران پروتونی می‌تواند احتمال وقوع اشکال توتومر را افزایش دهد یا به پایه‌ها آسیب برساند و در نتیجه خطاهای ذخیره‌سازی را ایجاد کند. جهش‌زاهای علاوه بر افزایش سرعت جهش‌های خودبه‌خودی، می‌توانند جهش‌های ناشی از دامیناسیون، اکسیداسیون و آلکیل شدن را ایجاد کنند.

DNA موضوع جهش‌ها و آسیب‌های مداوم است و سلول مکانیسم‌های مختلفی برای مقابله با آسیب‌ها دارد، از جمله مکانیسم برگشت مستقیم (مانند فعال‌سازی نور)، مکانیسم‌های برداشتن بازهای آسیب‌دیده مختلف (ترمیم برش نوکلئوتیدی (NER)، ترمیم برداشتن پایه (BER)، و تعمیر ناهماهنگی نوکلئوتیدی (NMR)، ترمیم آسیب تک رشته‌ای، ترمیم شکستگی‌های دو رشته‌ای، و سنتز ترجمه (TLS). در این بخش، فرض می‌کنیم که فقط جهش‌ها، انتقال‌ها یا جابجایی‌های ناشی از نقطه در فرآیند ترمیم DNA باقی مانده‌اند. اگرچه احتمال وقوع اشکال توتومر در شرایط محیطی معمولی خیلی کم است، می‌توانیم دامنه احتمال متناظر را بین شکل‌های استاندارد و توتومریک مرتبط کنیم و حالت‌های اسید نوکلئیک را به عنوان حالت‌های کوانتومی نشان دهیم. به عنوان مثال، حالات برهم نهی مربوط به T و C را می‌توان به صورت:

$$|T\rangle = \sqrt{1 - P_{100,pyr}}|010\rangle|pyr\rangle + \sqrt{P_{100,pyr}}|100\rangle|pyr\rangle \quad (1)$$

$$|C\rangle = \sqrt{1 - P_{010,pur} - P_{001,pur}}|100\rangle|pur\rangle + \sqrt{P_{010,pur}}|010\rangle|pur\rangle + \sqrt{P_{001,pur}}|001\rangle|pur\rangle \quad (2)$$

نشان داد. که در آن $|010\rangle|pyr\rangle$ شکل استاندارد T را نشان می‌دهد، در حالی که $|100\rangle|pyr\rangle$ شکل توتومریک متناظر، T* را که با احتمال $P_{100,pyr}$ در بازه عددی 10^{-5} تا 10^{-3} رخ می‌دهد، بیان می‌کند. همچنین $|100\rangle|pur\rangle$ شکل استاندارد C و دو حالت $|010\rangle|pur\rangle$ و $|001\rangle|pur\rangle$ اشکال توتومریک C* را با احتمالات $P_{001,pur}$ و $P_{010,pur}$ که در بازه عددی 10^{-5} تا 10^{-3} قرار دارند، نشان می‌دهد.

ما از علامت $|pyr\rangle$ ($|pur\rangle$) استفاده می‌کنیم تا مشخص کنیم که پایه مربوطه از نوع پیریمیدین (پورین) است، به طوری که بتوانیم به طور منحصر به فرد بین اشکال مختلف توتومر تمایز قائل شویم. به بیان دقیق، دامنه‌های احتمال رخداد

حالات مختلف، اعداد مختلط هستند. با این حال، از نقطه نظر نظریه اطلاعات کوانتومی، نمایش داده شده در بالا کافی است.

در ادامه نظر خود را تنها به حالت $|T\rangle$ در رابطه (۱) معطوف می‌کنیم. برای ادامه محاسبات این حالت را بر حسب کت‌های مستقل و به صورت زیر بازنویسی می‌کنیم:

$$|T\rangle = \sqrt{1 - P_{100,pyr}} |0_A\rangle |1_B\rangle |0_C\rangle |pyr\rangle + \sqrt{P_{100,pyr}} |1_A\rangle |0_B\rangle |0_C\rangle |pyr\rangle \quad (3)$$

همچنین جایگزینی $P_{100,pyr} \rightarrow \varepsilon^2$ را در نظر می‌گیریم.

اما از نظریه اطلاعات کوانتومی می‌دانیم که در کره بلوخ، یک چرخش به اندازه زاویه θ حول محور \hat{n} با معادله زیر داده می‌شود:

$$e^{i\alpha} \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) (n_x X + n_y Y + n_z Z) \right], \hat{n} = (n_x, n_y, n_z) \quad (4)$$

که در آن $e^{i\alpha}$ یک فاز کلی است، بنابراین α را می‌توان به دلخواه انتخاب کرد. در رابطه (۱)، به دلیل اینکه $\varepsilon \ll 1$ ، یک وارویی جزئی بیت مربوط به چرخش حول محور X به اندازه زاویه θ در کیوبیت‌های \mathcal{A} و \mathcal{B} دیده می‌شود. بنابراین خواهیم داشت $\hat{n} = (1, 0, 0)$ و همچنین α را $\pi/2$ انتخاب می‌کنیم. در نتیجه رابطه عملگر چرخش متناظر با این تعاریف می‌شود:

$$i \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) X \quad (5)$$

با در نظر گرفتن $\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \varepsilon$ خواهیم داشت $\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) = \sqrt{1 - \varepsilon^2}$ و می‌توان نوشت:

$$i \sqrt{1 - \varepsilon^2} I + \varepsilon X = i \sqrt{1 - \varepsilon^2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \varepsilon \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} i \sqrt{1 - \varepsilon^2} & \varepsilon \\ \varepsilon & i \sqrt{1 - \varepsilon^2} \end{bmatrix} \quad (6)$$

بنابراین وارویی جزئی بیت، نگاشت زیر را روی کیوبیت \mathcal{A} اعمال می‌کند:

$$|0_A\rangle \mapsto i \sqrt{1 - \varepsilon^2} |0_A\rangle + \varepsilon |1_A\rangle, |1_A\rangle \mapsto \varepsilon |0_A\rangle + i \sqrt{1 - \varepsilon^2} |1_A\rangle \quad (7)$$

همچنین وارویی جزئی بیت، نگاشت زیر را روی کیوبیت \mathcal{B} اعمال می‌کند:

$$|1_B\rangle \mapsto \varepsilon |0_B\rangle + i \sqrt{1 - \varepsilon^2} |1_B\rangle, |0_B\rangle \mapsto i \sqrt{1 - \varepsilon^2} |0_B\rangle + \varepsilon |1_B\rangle \quad (8)$$

وقتی $\theta = \pi$ در نتیجه $\varepsilon = 1$ و خواهیم داشت $|0\rangle \mapsto |1\rangle$ و $|1\rangle \mapsto |0\rangle$ ، که در این حالت یک وارویی کامل بیت داریم.

از مفاهیم اطلاعات کوانتومی استفاده کرده و ماتریس چگالی اولیه ρ_i را برای تیمین (T) استاندارد می‌نویسیم:

$$\rho_i = (\xi_i)(\xi_i)^\dagger \quad (9)$$

که در این رابطه:

$$\xi_i = |0_A\rangle |1_B\rangle |0_C\rangle |pyr\rangle, (\xi_i)^\dagger = \langle pyr | \langle 0_C | \langle 1_B | \langle 0_A | \quad (10)$$

از طرفی می‌توان ماتریس چگالی نهایی ρ_f را برای تیمین با جهش توتومریک به صورت:

$$\rho_f = (\xi_f)(\xi_f)^\dagger \quad (11)$$

نوشت که در این رابطه:

$$\xi_f = \sqrt{1 - \varepsilon^2} \left(i \sqrt{1 - \varepsilon^2} |0_A\rangle + \varepsilon |1_A\rangle \right) \left(\varepsilon |0_B\rangle + i \sqrt{1 - \varepsilon^2} |1_B\rangle \right) |0_C\rangle |pyr\rangle + \varepsilon \left(\varepsilon |0_A\rangle + i \sqrt{1 - \varepsilon^2} |1_A\rangle \right) \left(i \sqrt{1 - \varepsilon^2} |0_B\rangle + \varepsilon |1_B\rangle \right) |0_C\rangle |pyr\rangle \quad (12)$$

$$(\xi_f)^\dagger = \langle pyr | \langle 0_C | \left(\varepsilon \langle 0_B | - i \sqrt{1 - \varepsilon^2} \langle 1_B | \right) (\sqrt{1 - \varepsilon^2}) (-i \sqrt{1 - \varepsilon^2} \langle 0_A | + \varepsilon \langle 1_A |) + \langle pyr | \langle 0_C | \left(\varepsilon \langle 1_B | - i \sqrt{1 - \varepsilon^2} \langle 0_B | \right) (\varepsilon \langle 0_A | - i \sqrt{1 - \varepsilon^2} \langle 1_A |) \quad (13)$$

هستند.

۳. ماتریس چگالی حالت کوانتومی باز تیمین استاندارد

با استفاده از مطالب مطرح شده در بخش دوم، به ویژه رابطه (۹) ماتریس چگالی حالت تیمین استاندارد را به

صورت:

$$\rho_i = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (14)$$

به دست می‌آوریم. که به وضوح نسبت به سه بخش A و B و C غیرهمتنیده است.

۴. ماتریس چگالی حالت باز تیمین با جهش توتومریک

با استفاده از مطالب مطرح شده در بخش دوم، به ویژه روابط (۱۲) و (۱۳)، حالت کوانتومی باز تیمین با جهش

توتومریک، نسبت به بخش C یک حالت ضربی (غیردرهمتنیده) محسوب می‌شود. اما این حالت نسبت به دو بخش A و

B درهمتنیدگی جزئی دارد. ماتریس چگالی کاهیده برای بخش A با رد جزئی روی بخش B و به صورت:

$$[\rho_f]_A = \text{Tr}_B(\rho_f) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \zeta \varepsilon^2 \end{bmatrix} \quad (15)$$

محاسبه می‌شود. که متغیر ζ در بازه $\zeta \in [1, 2]$ قرار می‌گیرد. با استفاده از رابطه (۱۵)، می‌توان ویژه مقادیر ماتریس به

دست آمده را محاسبه کرد. این ویژه مقادیر به ترتیب $\lambda_1 = 1$ و $\lambda_2 = \zeta \varepsilon^2$ هستند. بنابراین عدد اشمیت ماتریس $[\rho_f]_A$

برابر دو است ($\text{Sch num} = 2 > 1$) که نشان دهنده این واقعیت است که دستگاه سه بخشی (A, B, C)

درهمتنیدگی جزئی دارد. همچنین برای حالت حدی $\varepsilon \rightarrow 0$ (تیمین استاندارد) عدد اشمیت ماتریس $[\rho_f]_A$ برابر یک

است ($\text{Sch num} = 1$) بنابراین حالت کوانتومی تیمین استاندارد همان گونه که ادعا شد، یک حالت ضربی یا

غیرهمتنیده است.

۵. نتیجه گیری

دنیای کوانتومی به صورت معمول به مقیاس‌های نانومتری محدود می‌شود. با این وجود درهم تنیدگی کوانتومی در ساختارهای ماکروسکوپی در مقیاس میکرون نشان داده شده اند. همچنین درهم تنیدگی کوانتومی به تازگی در مقیاس ماکروسکوپی در دمای اتاق نشان داده شده است. در این مقاله به بررسی اثرات کوانتومی در ساختارهای زیستی پرداخته شد. با استفاده از مفاهیم بنیادی در مکانیک کوانتومی، به ویژه نظریه محاسبات و اطلاعات کوانتومی، جهش توتومریک در باز تیمین استاندارد و درهم‌تنیدگی به وجود آمده در اثر این جهش برای باز تیمین جهش یافته با محاسبات دقیق مورد بحث قرار گرفت. این محاسبات نشان داد که حالت کوانتومی باز تیمین استاندارد، یک حالت ضربی یا غیردرهم‌تنیده است در حالی که حالت کوانتومی باز تیمین جهش یافته، یک حالت با درهم‌تنیدگی جزئی است. از مهم ترین اثرات این درهم‌تنیدگی کوانتومی، ثبات و پایداری باز تیمین جهش یافته خواهد بود. با وجود اینکه احتمال وقوع این جهش توتومریک از مرتبه 10^{-5} تا 10^{-3} است، محاسبات انجام شده نشان داد که این حالت، به دلیل درهم‌تنیدگی ایجاد شده یک حالت پایدار و در واقع غیر قابل چشم پوشی در جهش‌های ژنتیکی به حساب آمده و باید اثرات این نوع جهش‌ها را در ساختارهای زیستی با اهمیت دانست.

۶. قدردانی

از تمامی عزیزانی که در برگزاری این کنفرانس نقش داشته، اعم از دبیران علمی و اجرایی کنفرانس و بقیه دست اندرکاران کمال تشکر و قدردانی را دارم.

۷. مراجع

- [1] Wannier GH (1987) Statistical physics. Dover, New York (reprint)
- [2] Haynie DT (2008) Biological thermodynamics, 2nd edn. Cambridge University Press, Cambridge
- [3] Wolfe J (2002) Cellular thermodynamics. In: Encyclopedia of life sciences. Macmillan/Nature Publishing Group, London
- [4] Ball P (2011) Physics of life: the dawn of quantum biology. Nature 474:272–274
- [5] Haydon N, McGlynn SE, Robus O (2011) Speculation on quantum mechanics and the operation of life giving catalysts. Orig Life Evol Biosph 41:35–50
- [6] Karafyllidis IG (2008) Quantum mechanical model for information transfer from DNA to protein. Biosystems 93:191–198
- [7] Arndt M, Juffmann T, Vedral V (2009) Quantum physics meets biology. HFSP J 3:386–400