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

مطالعه‌ی نظری دینامیک درهم‌تنیدگی کوانتومی در 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 به شکل مجموعه‌ایی از فونون‌های حرارتی مدل‌بندی و برای نمایش آن‌ها از حالات همدوس استفاده می‌شود. عبارات تحلیلی دقیقی برای جمعیت هرکدام از مولکول‌های رنگدانه و درهم‌تنیدگی کوانتومی آن‌ها محاسبه شده است. نتایج عددی به دست آمده تطبیق خوبی با نتایج تجربی در دو حالت حدی جفت‌شدگی الکترونی ضعیف و قوی مولکول‌های رنگدانه نشان می‌دهند.

کلید واژه- انتقال انرژی برانگیختگی، درهم‌تنیدگی کوانتومی، ساختارهای پیچیده رنگدانه-پروتئین، ساختار فوتوسنتز دوتایی.

Theoretical Study of Quantum Entanglement Dynamics in a Photosynthetic Dimer System

Maryam Saberi[۱], Rasoul Roknizadeh[۲], and Malek Bagheri Harouni[۲]

Faculty of Physics, Shahid Beheshti University, G. C., Evin, ۱۹۸۳۹-۶۳۱۱۳ Tehran, Iran[۱]

Department of Physics, Quantum Optics Group, University of Isfahan, ۸۱۷۴۶ Isfahan, Iran[۲]

Abstract- In this paper, a new 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 a phonon bath and the coherent representation is investigated to display of their states. 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 for both limits of weak and strong electronic coupling at cryogenic and physiological temperatures.

Keywords: Excitation energy transfer, Quantum entanglement, Pigment-protein complex system, Photosynthetic dimer system.

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

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-04]

۱- مقدمه

انتقال انرژی برانگیختگی در سامانه‌های فوتوسنتز کننده‌ی طبیعی اهمیت ویژه‌ایی برای شناخت این پدیده‌ی بیولوژیکی دارد. مرحله‌ی اول پدیده‌ی فوتوسنتز در ساختارهای پیچیده‌ایی متشکل از مولکول‌های رنگدانه-پروتئین انجام می‌شود و طی آن انرژی فوتون جذب شده توسط آنتن‌های دریافت کننده انرژی به صورت انرژی برانگیختگی دربین رنگدانه‌ها منتقل شده تا به مرکز واکنش‌های شیمیایی برسد [۱]. مطالعات تجربی انجام شده روی این ساختارها بهره‌ی انتقال انرژی را نزدیک به یک نشان می‌دهد و این موضوع اهمیت توصیف نظری این پدیده را در زمینه‌ی کاربرد در ادوات اپتیکی در جهت افزایش بهره‌ی آن‌ها نشان می‌دهد [۲-۳]. هم‌چنین این ساختارهای طبیعی چند-ذره‌ایی ابزار مناسبی جهت اندازه‌گیری استاندارد همبستگی و درهم‌تنیدگی کوانتومی به حساب می‌آیند [۴]. در این زمینه مطالعات نظری با روش‌های تقریبی زیادی ارائه گردیده است [۵]، لذا لازم است برای توصیف دینامیک انتقال انرژی در این ساختارها روش‌های تحلیلی دقیقی ارائه شود.

در رهیافت تحلیلی ارائه شده، 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. محیط پروتئینی نیز با مجموعه‌ایی از فونون‌های حرارتی مدل‌بندی می‌شود. از نمایش حالت‌های همدوس برای نمایش حالت فونون‌ها استفاده کرده و با حل معادله شرودینگر، معادلات دینامیکی جمعیت و همدوسی به دست می‌آیند [۶]. این رهیافت به ما کمک می‌کند تا بتوان دینامیک انتقال انرژی و درهم‌تنیدگی کوانتومی را در هر دو حالت جفت-شدگی الکترونی ضعیف و قوی مولکول‌های رنگدانه در مقایسه با قدرت جفت‌شدگی رنگدانه-پروتئین به شکل تحلیلی مطالعه کنیم.

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 اکسیتون در یک ساختار فوتوسنتز کننده با دو جایگاه جفت شده‌ی الکترونی در برهم‌کنش با محیط فونونی فرمول‌بندی شده است. هامیلتونی سامانه کل $H = H_S + H_B + H_{S-B}$ شامل سه جمله است که هر جمله به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود ($\hbar = 1$):

$$
\begin{aligned}
H_S &= \sum_{i=1, i\neq j}^{2} (\varepsilon_i |i\rangle\langle i| + J(|i\rangle\langle j| + h.c)),\\
H_B &= \sum_n \omega_n b_n^\dagger b_n,\\
H_{S-B} &= \sum_{i=1}^{2}\sum_n \omega_n g_{ni} (b_n^\dagger + b_n)|i\rangle\langle i|.
\end{aligned}
\qquad (۱)
$$

H_S هامیلتونی زیر-سامانه‌ی دوتایی الکترونی است. $|1\rangle(|2\rangle)$ معرف حالتی است که جایگاه اول (دوم) برانگیخته و جایگاه دوم (اول) در حالت زمینه باشد. $\varepsilon_1(\varepsilon_2)$ انرژی برانگیختگی جایگاه اول (دوم) و J قدرت جفت‌شدگی الکترونی بین دو جایگاه مولکولی است. H_B هامیلتونی محیط فونونی و $b_n^\dagger b_n$ معرف عملگر نابودی (خلق) n-امین مد فونونی با بسامد ω_n است. H_{S-B} هامیلتونی برهم‌کنش زیر-سامانه الکترونی و محیط فونونی است و در نهایت g_{ni} قدرت جفت‌شدگی n-امین مد فونونی با i-امین جایگاه الکترونی است.

در لحظه‌ی اولیه $t = 0$، برهم‌کنشی بین زیر-سامانه الکترونی و محیط فونونی وجود ندارد و بنابراین می‌توان حالت اولیه سامانه کل را به شکل $\rho_0 = \rho_S \otimes \rho_B$ در نظر گرفت. با توجه به اینکه چگالی حالت در نمایش حالت‌های همدوس قطری است، در اینجا از مجموعه حالت‌های همدوس $|\{\alpha_n\}\rangle$ برای نمایش مدهای فونونی استفاده می‌شود. بنابراین حالت اولیه محیط فونونی به شکل $\rho_B = \int d^2\{\alpha_n\} P(\{\alpha_n\}) |\{\alpha_n\}\rangle\langle\{\alpha_n\}|$ در نظر گرفته می‌شود به طوری‌که $P(\{\alpha_n\}) = \prod_n p(\alpha_n)$ تابع توزیع برای مجموعه مدهای فونونی است. با توجه به این‌که محیط فونونی در حالت اولیه در دمای T در حالت تعادل حرارتی است تابع

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-04]

توزیع n-امین مد فونون به شکل $p(\alpha_n)=\exp(-|\alpha_n|^2/\pi\bar{n})$ در نظر گرفته می‌شود، به طوری‌که $\bar{n}=\left(\exp(\omega_n/KT)-1\right)^{-1}$ است. در زمان t، بعد از برهم کنش زیر-سامانه الکترونی با محیط فونونی، چگالی حالت سامانه کل را می‌توان به شکل $\rho_t=\int d^2\{\alpha_n\}P(\{\alpha_n\})|\psi_t\rangle\langle\psi_t|$ در نظر گرفت، بطوری‌که $|\psi_t\rangle$ معرف حالت سامانه کل در زمان t است و در نمایش حالت همدوس می‌توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$|\psi_t\rangle=\begin{bmatrix}c_1(t,\{\alpha_n\})|1,\{\alpha_n\}\rangle+\\ c_2(t,\{\alpha_n\})|2,\{\alpha_n\}\rangle\end{bmatrix}. \qquad (۲)$$

برای به دست آوردن ماتریس چگالی زیر-سامانه الکترونی روی درجات آزادی فونونی ردگیری جزیی $\sigma_t=tr_{phonon}(\rho_t)$ انجام می‌شود. به این ترتیب جملات جمعیتی در دو حالت جفت‌شدگی الکترونی ضعیف و قوی در مقایسه با قدرت جفت‌شدگی رنگدانه-پروتئین به ترتیب به شکل زیر خواهند بود:

$$\begin{aligned}\sigma_{11}(t)=&\cos^2(\eta)[a_1^2+b_1^2+2a_1b_1I\cos(\Delta t)]+\\ &\sin^2(\eta)[a_2^2+b_2^2+2a_2b_2I\cos(\Delta t)]+\\ &\sin(2\eta)[(a_1a_2+b_1b_2)\cos(\Delta t)+\\ &I((a_1b_2\cos(\Delta t)+b_1a_2))]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\sigma_{11}(t)=&\cos^2(\eta)[A_1^2+B_1^2+2A_1B_1I]+\\ &\sin^2(\eta)[A_2^2+B_2^2+2A_2B_2I]+\\ &\sin(2\eta)\cos(\Delta t)[(A_1A_2+B_1B_2)+\\ &I(A_1B_2+B_1A_2)]\end{aligned}$$

در این روابط $\eta=\frac{1}{2}\tan^{-1}(2J/\varepsilon_2-\varepsilon_1)$ و $\Delta=\sqrt{(\Delta\varepsilon)^2+4J^2}$، به طوری‌که $\Delta\varepsilon=\varepsilon_1-\varepsilon_2$ است. همین‌طور تابع همبستگی محیط فونونی به شکل

$$I=\int d\omega\exp[4\cos^2(2\eta)\frac{J(\omega)}{\omega^2}$$
$$(\coth(\beta\omega/2)\cos(\omega_nt)-i\sin(\omega_nt))]$$

در نظر گرفته می‌شود. به همین ترتیب ضرایب موجود در عبارات جمعیت را می‌توان به شکل زیر در نظر گرفت:

$$\begin{aligned}a_1&=\frac{-\sin(2\eta)}{2\cos(\eta)}(I_1\sin(\eta)+I_2\cos(\eta)),\\ a_2&=\frac{\sin(2\eta)}{2\cos(\eta)}(I_1\cos(\eta)-I_2\sin(\eta)),\\ b_1&=(I_1\cos(\eta)-I_2\sin(\eta))-a_1,\\ b_2&=(I_1\sin(\eta)+I_2\cos(\eta))-a_2,\\ B_2&=\frac{\cos(\eta)}{2}+(\frac{\sin(2\eta)-\cos(2\eta)}{2\sin(2\eta)})\\ &\quad(I_1\sin(\eta)+I_2\cos(\eta)),\\ B_1&=\frac{\sin(\eta)}{2}+(\frac{\sin(2\eta)+\cos(2\eta)}{2\sin(2\eta)})\\ &\quad(I_1\cos(\eta)-I_2\sin(\eta)),\\ A_1&=(I_1\cos(\eta)-I_2\sin(\eta))-B_1,\\ A_2&=(I_1\sin(\eta)+I_2\cos(\eta))-B_2.\end{aligned} \qquad (۴)$$

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

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

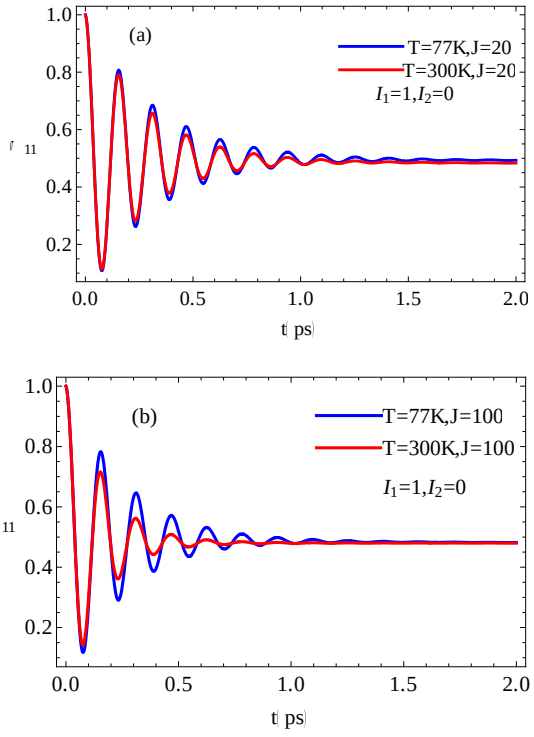
تعریف می‌شود. دراین رابطه λ_iها ویژه مقادیر ماتریس $\bar{\sigma}=\sigma(\sigma_y\otimes\sigma_y)^*\sigma(\sigma_y\otimes\sigma_y)$ در نظر گرفته می‌شوند و ماتریس σ مربوط به زیر-سامانه الکترونی دوتایی است.

۳- نتایج عددی

در این بخش نتایج عددی مربوط به محاسبات تحلیلی در بخش قبل را بیان و نتایج با داده‌های تجربی مقایسه می‌شوند. با توجه به اینکه چگالی حالت براونی $J(\omega)=2\lambda\gamma\frac{\omega}{\omega^2+\gamma^2}$ برای توصیف این‌گونه محیط‌ها 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. شکل (۱) تأثیر قدرت جفت‌شدگی الکترونی مولکول‌های رنگدانه و دمای محیط بر تحول زمانی جمعیت مولکول اول را نشان می‌دهد. زمان همدوسی در شکل (۱a) به ازای جفت‌شدگی ضعیف $J=20cm^{-1}$ ، $1.1ps$ برای دمای $300K$ و $1.5ps$ برای دمای $77K$ و در شکل (۱b) به ازای جفت‌شدگی قوی $J=100cm^{-1}$، $0.6ps$ برای دمای $300K$ و $1ps$

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-04]

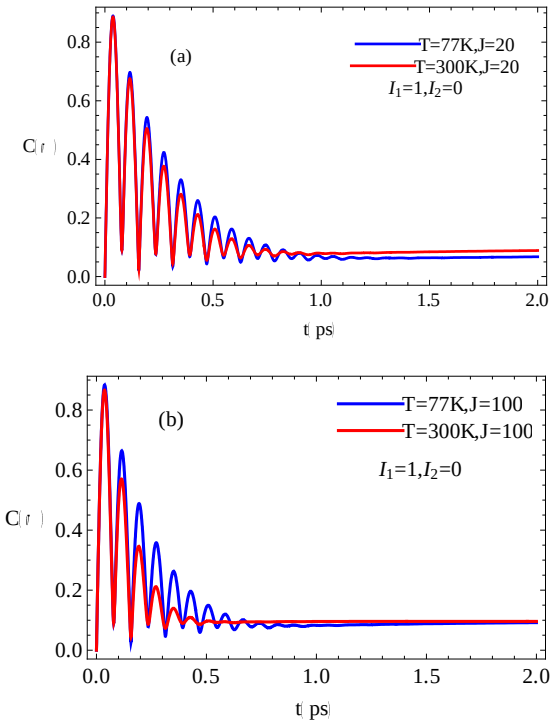
برای دمای $77K$ به دست آمده است. همان‌طور که انتظار داریم و مطابق نتایج تجربی زمان همدوسی انتقال انرژی با افزایش دما و جفت‌شدگی الکترونی کاهش یافته است [۷]. شکل (۲) تأثیر قدرت جفت‌شدگی الکترونی مولکول‌های رنگدانه و دمای محیط بر تحول زمانی درهم-تنیدگی دو مولکول رنگدانه را نشان می‌دهد. در لحظه‌ی $t=0$ به دلیل جایگزیدگی برانگیختگی در جایگاه اول، درهم‌تنیدگی صفر را بین دو جایگاه داریم. برای جفت-شدگی ضعیف $J=20cm^{-1}$ در شکل (۲a)، به ازای بازه زمانی $1ps$ اول و برای جفت‌شدگی الکترونی قوی $J=100cm^{-1}$ در شکل (۲b)، به ازای بازه زمانی $0.7\,ps$ اول بیشترین درهم‌تنیدگی بین دو جایگاه را شاهد هستیم.



شکل ۱: تحول زمانی جمعیت جایگاه اول در دو دمای T=۷۷K و ۳۰۰K به ازای (a) جفت‌شدگی الکترونی ضعیف و (b) جفت‌شدگی قوی الکترونی مولکول‌های رنگدانه

۴- نتیجه‌گیری

در روش مورد مطالعه در زمینه‌ی دینامیک درهم‌تنیدگی کوانتومی سامانه‌ی زیستی فوتوسنتزکننده دوتایی به عنوان سامانه‌های باز کوانتومی رهیافت جدیدی در توصیف محیط پروتئینی به کار گرفته شده است. با توجه به نتایج عددی به دست آمده و انطباق نسبتا خوب آن‌ها با نتایج تجربی در دو حد جفت شدگی الکترونی ضعیف و قوی مولکول‌های رنگدانه می‌توان به مفید بودن مدل‌بندی ارائه شده برای توصیف محیط پروتئینی در سامانه‌های زیستی پی برد.



شکل ۲: تحول زمانی جمعیت درهم‌تنیدگی دو جایگاه مولکولی در دو دمای T=۷۷K و ۳۰۰K به ازای (a) جفت‌شدگی الکترونی ضعیف و (b) جفت‌شدگی قوی الکترونی مولکول‌های رنگدانه

مراجع

[۱] Blankenship R E. *Molecular Mechanisms of Photosynthesis*, World Scientific, London ۲۰۰۲.

[۲] Engel G. S. *Evidence for wavelike energy transfer through quantum coherence in photosynthetic systems*, **Nature,** ٤٤٦ (۲۰۰۷) ۷۸۲.

[۳] Collini E. and Scholes G.,Science, ۳۲۳ (۲۰۰۹) ۳٦۹-۷۳.

[٤] Sarovar M., Ishizaki A., Fleming G. R. and Whaley K. B., *Quantum entanglement of photosynthetic light harvesting*, **Nat. Phys.** ٦ (۲۰۱۰) ٤٦۲.

[٥] Ishizaki A. and Fleming G. R, *Unified treatment of quantum coherent and incoherent hopping dynamics in electronic energy transfer: Reduced hierarchy equation approach* **J. chem. Phys.** ۱۳۰ (۲۰۰۹) ۲۳٤۱۱۱, ۱۳۰ (۲۰۰۹) ۲۳٤۱۱۰.

[٦] Scully M. O. and Zubairy M. S., *Quantum Optics*, p. ٤٤, Cambridge University Press, ۱۹۹۷.

[۷] Mercer I. P., **Phys Rev. Lett.** ۱۰۲ (۲۰۰۹) ۰٥۷٤۰۲.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-04]