

Applied molecular biology
Vol.4, issu.7, Summer. 2025
p.p 21-36

An interdisciplinary approach to the relationship between biological structure and quantum physics concepts: Quantum fidelity analysis in the context of thymine base tautomeric mutation

Seyed Mohsen Moosavi Khansari

Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Ayatollah Boroujerdi University, Boroujerd, IRAN (m.moosavikhansari@abru.ac.ir, ORCID: 0000-0001-6118-0525)

Article history:

Received:21/08/2025

Revised:25/08/2025

Accepted:03/09/2025

Abstract

In recent decades, the interconnection of biological concepts with quantum physics has enabled the study of fundamental biological processes from the perspective of quantum computation and information. This research aims to investigate the phenomenology of quantum fidelity in biological-quantum systems, which can lead to an improved understanding of how information is transferred and how quantum states remain stable in biological environments. In this study, we investigated the relationship between the biological structure and quantum physics concepts, focusing on the quantum fidelity in information channels affecting the tautomeric mutation of thymine bases, and analyzed the behavior of the quantum fidelity function with respect to the mutation probability. Quantum fidelity modeling was performed using a nonlinear function in terms of mutation probability, fitting this function to the simulation-analytical data, and extracting the minimum fidelity using the quantum fidelity criterion $F(\rho_i, \rho_f)$, analyzing the phenomenon of the fidelity graph rising in the probability range (ϵ) from 0.617 to 0.99, and its physical interpretation in the form of quantum maps. The minimum fidelity is obtained for $\epsilon \approx 0.617$ and $F(0.617) \approx 0.0018$, and with increasing mutation probability, the fidelity graph again tends toward the standard base state, which indicates that the device tends to remain faithful to the standard open state.

Keywords: Quantum physics, Tautomeric mutation, Quantum fidelity, DNA, Genetics

رویکردی بین‌رشته‌ای به ارتباط ساختار زیستی با مفاهیم فیزیک کوانتومی: تحلیل وفاداری کوانتومی در قالب جهش توتومریک باز تیمین

سید محسن موسوی خوانساری

استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آیت‌الله بروجردی

(m.moosavikhansari@abru.ac.ir, ORCID: 0000-0001-6118-0525)

تاریخ بارگزاری: ۱۴۰۴/۰۵/۳۰ تاریخ بازنگری: ۱۴۰۴/۰۶/۰۳ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۰۶/۱۲

چکیده

در دهه‌های اخیر، ارتباط متقابل مفاهیم زیستی با فیزیک کوانتومی امکان می‌دهد تا فرایندهای بنیادی زیستی از منظر محاسبات و اطلاعات کوانتومی بررسی شوند. این تحقیق پدیدارشناسی وفاداری کوانتومی در سیستم‌های زیستی-کوانتومی را هدف قرار می‌دهد و می‌تواند به بهبود درک از چگونگی انتقال اطلاعات و پایداری حالت‌های کوانتومی در محیط بیولوژیکی منجر شود. در این مطالعه به بررسی رابطه بین ساختار زیستی و مفاهیم فیزیک کوانتومی با تمرکز بر وفاداری کوانتومی در کانال‌های اطلاعاتی اثرگذار در جهش توتومریک باز تیمین پرداخته و رفتار تابع وفاداری کوانتومی نسبت به احتمال جهش را تحلیل کرده‌ایم. مدل‌سازی وفاداری کوانتومی با استفاده از یک تابع غیرخطی برحسب احتمال جهش، برازش این تابع با داده‌های شبیه‌سازی-تحلیلی و استخراج حداقل وفاداری با استفاده از معیار وفاداری کوانتومی $F(\rho_i, \rho_f)$ ، تحلیل پدیده صعودی شدن نمودار وفاداری در بازه احتمال (ϵ) از ۰,۶۱۷ تا ۰,۹۹ و تفسیر فیزیکی آن در قالب نگاشت‌های کوانتومی، انجام شد. حداقل وفاداری به‌ازای $\epsilon \approx 0.617$ و $F(0.617) \approx 0.0018$ به‌دست می‌آید و با افزایش احتمال جهش، نمودار وفاداری دوباره به‌سمت حالت پایه تیمین استاندارد میل می‌کند، که نشان می‌دهد دستگاه تمایل دارد به حالت استاندارد باز، وفادار باقی بماند.

واژه‌های کلیدی: فیزیک کوانتومی، جهش توتومریک، وفاداری کوانتومی، DNA و ژنتیک.

۱. مقدمه

ترمودینامیک و اصول فیزیک آماری به‌طور وسیعی برای توصیف فرایندهای مختلف در سلول‌ها استفاده می‌شوند [۱-۳]. علاوه بر این، مفاهیم علوم کامپیوتر و ارتباطات نیز برای توصیف دینامیک درون و بین‌سلولی استفاده شده است. به‌تازگی مطالعات بیولوژیکی کوانتومی شتاب بیشتری به‌دست 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 تحریک را سرعت می‌بخشد. علاوه بر این، همانندسازی DNA و سنتز پروتئین با استفاده از الگوریتم جست‌وجوی گروور توصیف شده است.

الگوریتم جست‌وجوی گروور (Grover's search) یک الگوریتم کوانتومی است که امکان یافتن یک عنصر نامشخص در یک حالت را از میان N عنصر را در زمان تقریبی با مرتبه \sqrt{N} فراهم می‌کند. این الگوریتم با ترکیب آماده‌سازی حالت برابر و چرخش‌های گوناگون به‌طور تکراری از توزیع احتمال عنصر هدف را تقویت می‌کند تا شاخص جست‌وجو با کارایی غیرکلاسیک افزایش یابد [۷].

همچنین تلاش‌های زیادی برای توضیح ساختار کد ژنتیکی و انتقال اطلاعات از DNA به پروتئین با استفاده از مفاهیم مکانیک کوانتومی صورت گرفته است. به‌عنوان مثال، مدل مکانیکی کوانتومی عمومی برای توصیف انتقال اطلاعات از DNA به پروتئین با استفاده از نظریه اطلاعات کوانتومی توسط Karafyllidis ارائه شده است [۸].

با این حال، با توجه به پیچیدگی بالای مسئله، تعیین ظرفیت کانال بیولوژیکی

کوانتومی که به معنای حداکثر اندازه‌گیری یا انتقال اطلاعات و انرژی از طریق مسیرهای زیستی با اثرات کوانتومی است، با استفاده از سازوکارهایی همچون هم‌ارزایی دامنه‌های کوانتومی و تداخل در سیستم‌های زنده، می‌تواند کارکردهای بیولوژیکی را تحت تأثیر قرار دهد. این مفهوم به بررسی این موضوع می‌پردازد که چگونه سازوکارهای ترمودینامیکی، ساختار زیستی و پویایی‌های کوانتومی مولکولی با هم در تراز مولکولی تعامل می‌کنند تا کارکردهای زیستی پیچیده را در شرایط غیرتعادلی توضیح دهند [۹]. 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 به‌عنوان 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 فرایندهای بیولوژیکی را زیر سؤال می‌برد [۱۰].

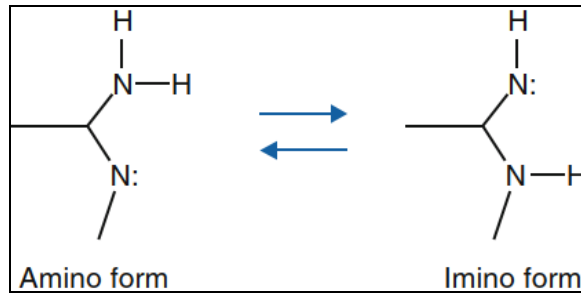
این تحقیق با رویکردی بین‌رشته‌ای به ارتباط بین ساختار زیستی و پاسخ‌های ترمودینامیک می‌پردازد، تا چارچوبی نظری - بنیادی برای توضیح تسهیم انرژی و اطلاعات در مسیرهای زیستی ارائه دهد و از این طریق امکان پیش‌بینی رفتار سیستم‌های زیستی پیچیده را در شرایط غیرتعادلی و با دامنه کارکرد کوانتومی-زیست‌فیزیکی فراهم آورد.

۲. روش‌ها

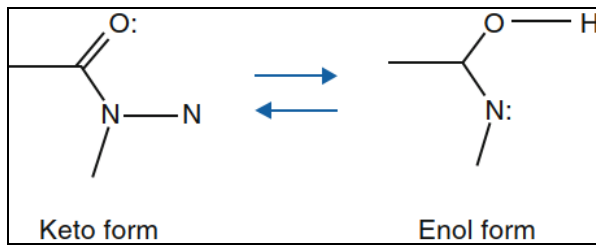
جهش‌های نقطه‌ای توسط اشکال توتومریک اسیدهای نوکلئیک ایجاد می‌شوند. دو شکل اصلی توتومریسم وجود دارد:

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

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

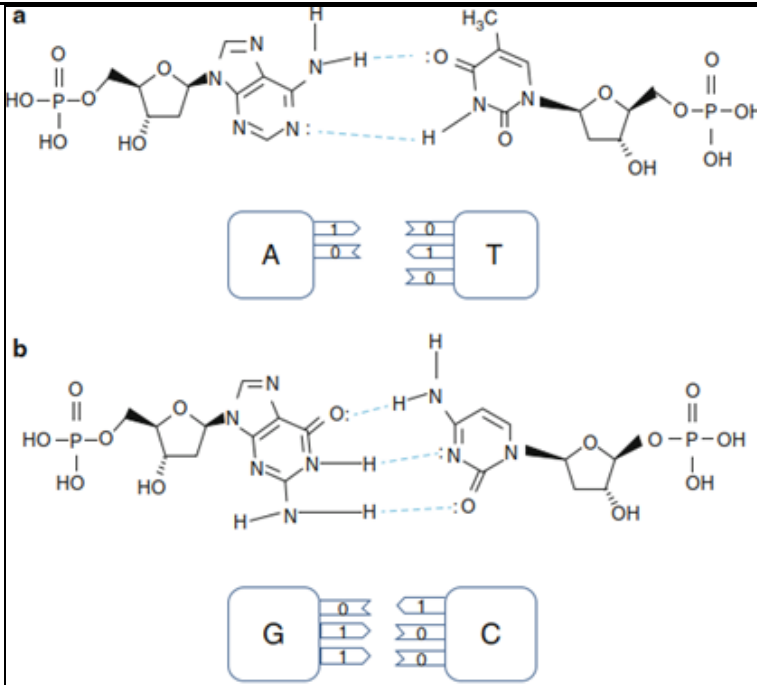


شکل ۱. توتومریسم آمینو-ایمینو

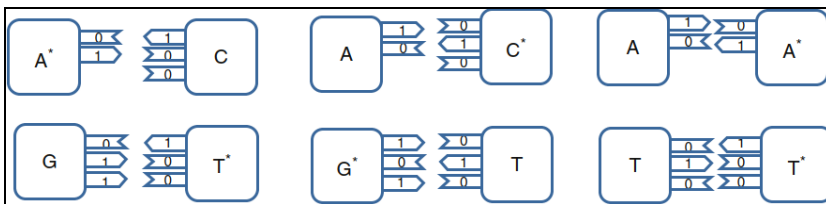


شکل ۲. توتومریسم کتو-انول

شکل‌های آمینو و کتو به‌عنوان 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. به‌عنوان مثال، جفت شدن نوکلئوتیدها برای ترکیبات $T = A$ و $C = G$ ، که در آن (-) نشان‌دهنده پیوند هیدروژنی است در شکل ۳ مشاهده می‌شوند.



شکل ۳. جفت شدن اسیدهای نوکلئیک استاندارد، نماد 1 برای نشان دادن «دهنده» یک پروتون استفاده می‌شود درحالی‌که نماد 0 برای نشان دادن «پذیرنده» یک پروتون استفاده می‌شود. در شکل ۳، همچنین الگووار اهداکننده‌های پروتون با نماد 1، درحالی‌که پذیرنده‌های 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 تک‌الکترون، 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. به‌عنوان نمونه، توتومر **A*** به‌جای **T** به **C** متصل می‌شود (**U** در **mRNA**)، توتومر **C*** با **A** و توتومر **G*** با **T** (**U**) متصل می‌شوند. 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.

به‌عنوان مثال، زمانی که **DNA** برای ذخیره‌سازی طولانی مدت اطلاعات ژنتیکی استفاده می‌شود، تونل‌زنی پروتون (ایجاد اشکال توتومریک) می‌تواند به معرفی خطاهای تصادفی کمک کند. احتمال وقوع اشکال اسیدهای نوکلئیک توتومریک خیلی کم است، به‌طوری که منطقی است که اشتباهات وارد شده توسط این اشکال را تصادفی فرض کنیم [۱۱].

باین‌حال، وجود جهش‌زها، سرطان‌زها، 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. جهش‌زها علاوه بر افزایش سرعت جهش‌های خودبه‌خودی، می‌توانند جهش‌های ناشی از دامیناسیون، اکسیداسیون و آلکیل شدن را ایجاد کنند [۱۲].

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)، تعمیر ناهماهنگی نوکلئوتیدی (NMR)، ترمیم آسیب تک‌رشته‌ای، ترمیم شکستگی‌های دو رشته‌ای، و سنتز ترجمه (TLS) [۱۳].

در این بخش، فرض می‌کنیم که فقط جهش‌ها، انتقال‌ها یا جابه‌جایی‌های ناشی از نقطه در فرایند 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 به‌عنوان حالت‌های کوانتومی نشان دهیم. به‌عنوان مثال، حالات برهم نهی مربوط به T و C را می‌توان به‌صورت زیر 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.

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

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

ما از علامت $|pyr\rangle|pur\rangle$ استفاده می‌کنیم تا مشخص کنیم که پایه مربوطه از نوع پیریمیدین (پورین) است، به‌طوری‌که بتوانیم به‌طور منحصر به‌فرد بین اشکال مختلف توتومر تمایز قائل شویم. به بیان دقیق، دامنه‌های احتمال رخداد حالات مختلف، اعداد مختلط هستند. با این حال، از نقطه‌نظر 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 برحسب کت‌های مستقل و به‌صورت 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 این که $\varepsilon \ll 1$ ، 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:

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

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

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

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:

$$(\xi_i)^\dagger = \langle \text{pyr} | \langle 0_{\mathcal{A}} | \langle 1_{\mathcal{B}} | \langle 0_{\mathcal{C}} | \xi_i = |0_{\mathcal{A}}\rangle |1_{\mathcal{B}}\rangle |0_{\mathcal{C}}\rangle | \text{pyr} \rangle \quad (10)$$

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:

$$\xi_f = \sqrt{1 - \varepsilon^2} \left(i\sqrt{1 - \varepsilon^2}|0_{\mathcal{A}}\rangle + \varepsilon|1_{\mathcal{A}}\rangle \right) \left(\varepsilon|0_{\mathcal{B}}\rangle + i\sqrt{1 - \varepsilon^2}|1_{\mathcal{B}}\rangle \right) |0_{\mathcal{C}}\rangle | \text{pyr} \rangle + \varepsilon \left(\varepsilon|0_{\mathcal{A}}\rangle + i\sqrt{1 - \varepsilon^2}|1_{\mathcal{A}}\rangle \right) \left(i\sqrt{1 - \varepsilon^2}|0_{\mathcal{B}}\rangle + \varepsilon|1_{\mathcal{B}}\rangle \right) |0_{\mathcal{C}}\rangle | \text{pyr} \rangle \quad (12)$$

که متغیرهای تعریف شده در آن به صورت زیر بوده:

$$\delta_1 = 1.002 \times 10^{-6}, \tau_1 = 0.9999, \chi_1 = 9.9799 \times 10^{-7} \quad (16)$$

و وقتی که احتمال وقوع جهش توتومریک $\varepsilon = 10^{-5}$ باشد، به صورت:

$$[\rho_f]_{\varepsilon=10^{-5}} = \begin{bmatrix} \delta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \delta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tau_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \chi_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \chi_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \delta_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \delta_2 \end{bmatrix} \quad (17)$$

محاسبه شده که متغیرهای تعریف شده در آن به صورت زیر خواهد بود:

$$\delta_2 = 1.00002 \times 10^{-10}, \tau_2 = 1, \chi_2 = 9.9998 \times 10^{-11} \quad (18)$$

۵. معیار وفاداری کوانتومی

یکی از سنجه‌هایی که برای بررسی میزان تغییرات یک دستگاه کوانتومی به کار می‌رود، معیار وفاداری کوانتومی است. این معیار میزان نزدیک بودن دو حالت مختلف از یک دستگاه کوانتومی را نشان می‌دهد. این دو حالت در تحقیق حاضر می‌توانند حالت استاندارد و حالت جهش‌یافته باز تیمین باشند. رابطه ریاضی اساسی برای معیار وفاداری کوانتومی به صورت زیر تعریف می‌شود:

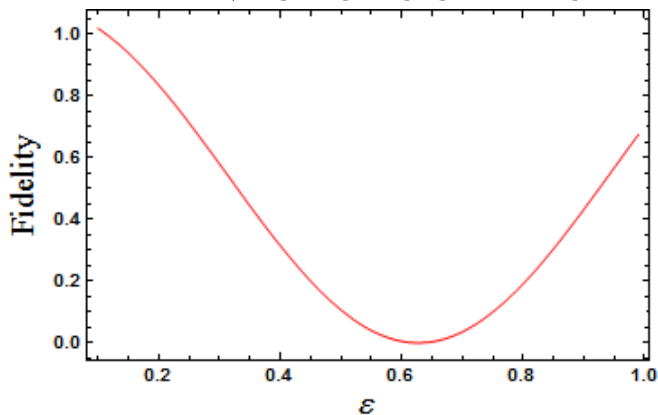
$$F(\rho_i, \rho_f) \equiv \left[\text{tr}(\sqrt{\sqrt{\rho_i} \rho_f \sqrt{\rho_i}}) \right]^2 \quad (19)$$

حال می‌توان معیار وفاداری کوانتومی را برای حالت استاندارد و حالت جهش‌یافته باز تیمین وقتی احتمال وقوع این جهش $\varepsilon = 10^{-5}$ است به میزان $[F]_{\varepsilon=10^{-5}} \sim 1$ به دست آورد. این میزان برای احتمال وقوع $\varepsilon = 10^{-3}$ به مقدار $[F]_{\varepsilon=10^{-3}} \sim 0.999996$ کاهش می‌یابد.

برای تعیین تابع معیار وفاداری کوانتومی بر حسب متغیر احتمال وقوع جهش، ε ، از روش برازش غیرخطی استفاده می‌کنیم. با استفاده از برنامه‌های رایانه‌ای می‌توان رابطه ریاضی مورد نظر را به صورت زیر برآورد کرد:

$$F(\varepsilon) = 1.08517 \cos^2(2.50471 \varepsilon) \quad (20)$$

نمودار تابع $F(\varepsilon)$ برحسب ε نیز در شکل ۶ ترسیم شده است.



شکل ۶. نمودار تابع (برازش غیرخطی) وفاداری کوانتومی برحسب احتمال وقوع جهش

۶. بحث و نتیجه‌گیری

در این تحقیق سعی شد که بین بررسی ساختارهای زیستی و مفاهیم بنیادی فیزیک کوانتومی، به‌طور خاص محاسبات و اطلاعات کوانتومی ارتباط برقرار شود. ضرورت امر البته بدیع بودن این مقوله بین‌رشته‌ای از علوم پایه یعنی دو علم پایه‌ای فیزیک و زیست‌شناسی و انجام پژوهش‌های نوآورانه در این حوزه است. ساختار زیستی و مفهوم بنیادی مورد نظر، به ترتیب جهش توتومریک باز تیمین و معیار وفاداری کوانتومی، برگرفته از نظریه اطلاعات کوانتومی بودند. احتمال وقوع جهش توتومریک باز تیمین را ε در نظر گرفته و این متغیر را به وفاداری کوانتومی مرتبط ساختیم. سنج وفاداری به‌ازای دو حالت از احتمال وقوع این جهش یعنی مقادیر $\varepsilon = 10^{-5}$ و $\varepsilon = 10^{-3}$ به ترتیب 1 و 0.999996 به‌دست آمد. همچنین به منظور معرفی یک تابع ریاضی برای این معیار برحسب احتمال وقوع جهش به رابطه $F(\varepsilon) = 1.08517 \cos^2(2.50471 \varepsilon)$ با استفاده از روش برازش غیرخطی، که در آنالیز عددی مطرح می‌شود، دست یافتیم. در ادامه نمودار این تابع برحسب احتمال وقوع جهش را به منظور ایجاد درک شهودی از این معیار کوانتومی ترسیم کردیم. با استفاده از این نمودار، کمینه وفاداری کوانتومی به‌ازای

$\varepsilon = 0.617$ و به میزان $F(0.617) = 0.0018$ به دست آمد، اما جالب‌ترین بخش این تحقیق، صعودی شدن نمودار وفاداری از نقطه احتمال $\varepsilon = 0.617$ تا $\varepsilon = 0.99$ بود. به‌طور معمول می‌بایست این نمودار نزولی اکید بین احتمال $\varepsilon = 0$ تا $\varepsilon = 1$ باشد، اما در کمال تعجب دیده می‌شود که با افزایش احتمال جهش توتومریک، معیار وفاداری دوباره به سمت یک میل می‌کند. بدین معنی که دستگاه تمایل دارد به حالت اولیه یعنی حالت باز تیمین استاندارد پایبند بماند.

نتایج این تحقیق نشان می‌دهد که هر یک از روش‌های تحلیل مدل‌های کوانتومی انتشاری FMO و مدل‌های مرتبط، رویکردهای آماری-ترمودینامیکی و شبیه‌سازی‌های ماتریسی در بازه‌های متغییری متفاوت عملکرد و حساسیت متمایزی از خود نشان می‌دهند، به‌طور مشخص، روش‌های مبتنی بر پارامتر ε در توانایی حفظ همبستگی کوانتومی حساس‌تر بوده و نوسانات کوچک ε تفاوت‌های آشکاری در تابع وفاداری ایجاد می‌کند؛ این تفاوت‌ها عمدتاً ناشی از فروپاشی هم‌دوسی (decoherence) و اختلاف در شروط اولیه یعنی حالت ρ_i و چیدمان ξ_i است که در مدل‌های ماتریسی با تقریب‌های مرتبه ε^2 نادیده گرفته می‌شوند.

مراجع

1. Wannier, G.H. (1987). *Statistical physics*, Dover, New York.
2. Haynie, D.T. (2008). *Biological thermodynamics*, 2nd edn, Cambridge University Press, Cambridge. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511802690>
3. Wolfe, J. (2002). *Encyclopedia of life sciences*, Cellular thermodynamics Macmillan Nature Publishing Group, London. <https://doi.org/10.1038/npg.els.0001363>
4. Ball, P. (2011). "the dawn of quantum biology, Physics of life", *Nature* 474, 272–274. <https://doi.org/10.1038/474272a>
5. Haydon, N., McGlynn S.E., Robus, O., (2011). "Speculation on quantum mechanics and the operation of life giving catalysts", *Orig Life Evol Biosph* 41, 35–50. <https://doi.org/10.1007/s11084-010-9210-5>
6. Karafyllidis, I.G. (2008), "Quantum mechanical model for information transfer from DNA to protein", *Biosystems*, 93, 191–198. <https://doi.org/10.1016/j.biosystems.2008.04.002>
7. Grover, L.K. (1996). "A fast quantum mechanical algorithm for database search," in *Proceedings of the 28th Annual ACM Symposium on Theory of Computing (STOC)*, 212–219. doi:10.1145/237814.237866
8. Karafyllidis, A. (1997). "A quantum mechanical model for the transmission of genetic information," *Physics Letters A*, vol. 236, no. 5-6, 431–434. doi:10.1016/S0375-9601(97)00641-5.
9. Lloyd, S. (2011). "Quantum coherence in biological systems," *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 302, Art. no. 012037. doi:10.1088/1742-6596/302/1/012037.
10. Arndt, M., Juffmann, T., Vedral, V. (2009). "Quantum physics meets biology", *HFSP J*, 3:386–400. <https://doi.org/10.2976/1.3244985>
11. L. Pauling, L., Corey, R.B., "The structure of nucleic acids: A proposal for the tautomeric shifts and proton transfer in bases," (classical discussions include Pauling's and Watson–Crick era insights).
12. Cadet, J., Douki, T., Ravanat, J.-L. (2008). "Oxidatively generated damage to nucleic acids: mechanisms, mutagenic properties and repair". *Biochimie*, 90(1), 17–32. doi:10.1016/j.biochi.2007.09.011
13. Friedberg, E.C., Walker, G. C., Siede, W. (2006). "DNA Repair and Mutagenesis (2nd ed.)". *ASM Press*.

