

ランダウアモデルによる DNA ナノワイヤーの量子輸送過程

(九大先導研) ○多田朋史、近藤正一、吉澤一成

【序】DNA 分子の電気伝導現象を理解し制御することは、DNA 分子を分子デバイスとして利用する上で必要不可欠であり、遺伝子損傷や突然変異のメカニズムとも関連しているため分子生物学においても非常に重要な研究課題とされている。現在までに、多くの研究グループによって、この DNA 分子に関する電気伝導現象の実験がなされてきているが、DNA 分子に含まれる塩基配列のランダムさや、電導特性測定の際の電極との接触に関する情報が非常に不鮮明であるため、DNA 分子が導体として振る舞うのか、あるいは絶縁体として振る舞うのかよく分かっていない（例えば、半導体[1,2]、絶縁体[3]としての報告がある）。伝導メカニズムに関しては、ホッピング機構とトンネル機構がその主な機構であるとされており、光照射などにより誘起されたグアニン上のホールが近距離においてはトンネル機構で輸送され、長距離ではホッピングを行うことで非常に長い距離を移動できることが確認されている。一方、電子輸送に関しては、極低温での実験において DNA 分子の長さが 4nm 以下のときはトンネル電流が流れる、という報告がなされている。そこで、本研究では、アデニン (A) とチミン (T) のみからなる約 4nm の DNA ワイヤーについて、その電子輸送をトンネル機構を用いて理論的に考えることにした。

【方法】量子細線にトンネル電流が流れる際のコンダクタンスを与える理論の一つにランダウアモデルがある。ランダウアモデルでは散乱体（分子など）が理想的な導線を介して無限の電子溜めに接続されており、散乱体による電子の透過確率 T が回路のコンダクタンス g に比例している、というものである（式 1）。

$$g = \frac{2e^2}{h} T(E_F) \quad (1)$$

ここで E_F はフェルミエネルギーを表している。透過確率 T は非平衡グリーン関数を利用することで計算できることが知られており、非常にシンプルな一次元モデルにおいて Caroli らが導出した透過確率の式を DNA 分子にも適用できるよう拡張して計算を行った。今回取り扱った系は、A と T のペアが 12 個並んだ DNA 分子（766 原子）を金の導線に接触させたものであり（図 1）、導線

を塩基対に近づけた場合と、DNA の側面に近づけた場合の二つの接続についてそのコンダクタンスを見積もった[4]。透過確率の計算では、金電極表面の状態密度と、電極にはさまれた分子の電子状態に関する情報（分子軌道）が必要になるが、金表面の状態密度は $0.07 \text{ state/ev} \cdot \text{atom}$ という値になることが知られているので、その値を用い、DNA の電子状態計算においては拡張ヒュッケル法を用いた。

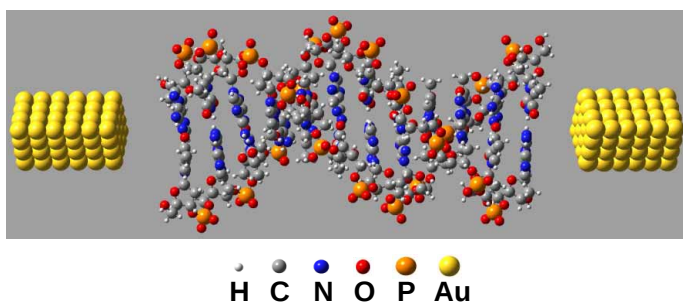


図1 (AT)₁₂DNA分子と金の導線からなる拡張分子。導線は塩基対近傍に配置されている。

【結果】金電極を塩基対に近づけた場合において得られた透過確率を図2に示した。A-A は DNA の両末端のアデニンに電極を近づけた場合に相当し、T-T は両末端のチミンに電極を近づけた場合に相当する。どのパターンにおいても、その透過確率のフェルミエネルギーにおける値は 10^{-8} から 10^{-9} のオーダーとなり、 π 共役している分子ワイヤーの透過確率よりも非常に低いものとなった。この透過確率を積分することで電流の大きさを見積もることができるが、A-A 接続の場合ではナノアンペアオーダーの電流が流れていることが分かった。そ

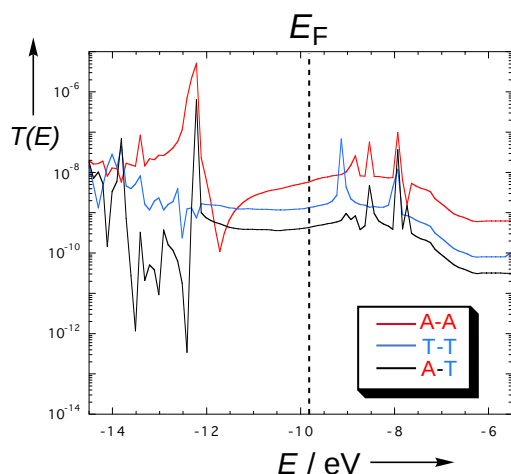


図2 計算により得られた透過確率。

れに対し、電極を DNA 分子の側面に近づけた場合においては、透過確率が 10^{-12} のオーダーとなり、電流の大きさはピコアンペア以下となった。この結果から、DNA に流れる電流の大きさは金電極との接続部位に大きく依存していることが分かる。当日は、分子軌道とコンダクタンスの相関関係[5,6]も考慮しながら、この DNA の電気伝導現象について詳細に報告する。

- [1] H.-W. Fink, C. Schönenberger, *Nature* **1999**, 398, 407.
- [2] K.-H. Yoo, D. H. Ha, J.-O. Lee, J. W. Park, J. Kim, J. J. Kim, H.-Y. Lee, T. Kawai, H. Y. Choi, *Phys. Rev. Lett.* **2001**, 87, 198102.
- [3] Y. Zhang, R. H. Austin, J. Kraeft, E. C. Cox, N. P. Ong, *Phys. Rev. Lett.* **2002**, 89, 198102.
- [4] T. Tada, M. Kondo, K. Yoshizawa, *ChemPhysChem*, in press.
- [5] T. Tada, K. Yoshizawa, *ChemPhysChem* **2002**, 3, 1035-1037.
- [6] T. Tada, K. Yoshizawa, *J. Phys. Chem. B*, in press.