

Электронный логический вентиль ХОР на основе ДНК

В.Д. Лахно*, В.Б. Султанов**

*Институт математических проблем биологии, Российская академия наук, Пущино,
Московская область, 142290, Россия*

Аннотация. Рассмотрен двухцепочечный олигонуклеотид с управляющими электродами, реализующий логический элемент ХОР.

Ключевые слова: нанобиоэлектроника, логический элемент, ДНК.

Целью нанобиоэлектроники является использование процессов, происходящих в биомакромолекулах, в которых определяющую роль играют электроны, для создания приборов и устройств молекулярных размеров. Ввиду своих малых размеров, уникальных свойств и способности к самоорганизации широкое применение в нанoeлектронике может найти молекула ДНК [1–2]. Среди потенциальных приложений молекулы ДНК – создание на ее основе логических вентилях и памяти нанометровых размеров. Возможность создания памяти на основе ДНК (вируса табачной мозаики) недавно была продемонстрирована в работе [3]. В данной работе приводится конкретный пример олигонуклеотида, с помощью которого можно реализовать логический вентиль ХОР (исключающее ИЛИ). Мы покажем, что функционирующий на основе ДНК вентиль аналогичен используемому в твердотельной электронике на основе структур металл-окисел-полупроводник.

Рассматриваемый нами олигонуклеотид (рис. 1) представляет собой ДНК дуплекс (за исключением концевых гуанинов цепи 5'–3'), в котором перенос дырки (катион радикала) от гуанина G_{5'} на левом конце к гуанину G_{3'} на правом конце управляется входящими потенциалами V₁ (на аденине A₇) и V₂ (на аденине A₁₀).

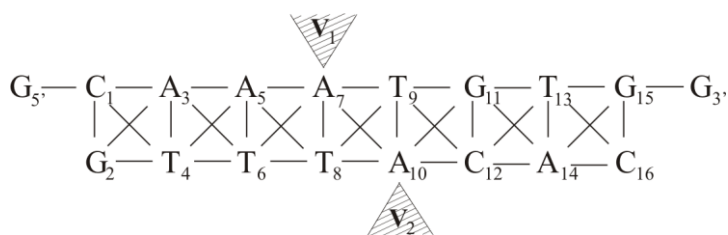


Рис. 1. ДНК дуплекс с управляющими потенциалами V₁ и V₂.

В изображенной на рисунке 1 нуклеотидной последовательности перенос заряда определяется матричными элементами перехода заряда между всеми соседними нуклеотидами. Значения матричных элементов перехода в случае, когда перенос заряда осуществляется дырками, даны в таблице 1.

* lak@impb.psn.ru

** sultanov@impb.psn.ru

Таблица 1. Матричные элементы переходов электрона (в эВ) между соседними нуклеотидами в ДНК [4,5] и потенциалы окисления нуклеотидов [6].

Переходы внутри цепи									
5' → 3'					3' → 5'				
	A	C	T	G		A	C	T	G
A	0.030	0.061	0.105	0.049	A	0.030	0.029	0.086	0.089
C	0.029	0.041	0.1	0.042	C	0.061	0.041	0.076	0.110
T	0.086	0.076	0.158	0.085	T	0.105	0.1	0.158	0.137
G	0.089	0.110	0.137	0.084	G	0.049	0.042	0.085	0.084

Переходы между цепями									
5' → 5'					3' → 3'				
	A	C	T	G		A	C	T	G
A	0.035	0	0.016	0.021	A	0.062	0	0.016	0.021
C	0	0.0007	0	0	C	0	0	0	0
T	0.016	0	0.002	0	T	0.007	0	0.002	0
G	0.021	0	0.009	0.019	G	0.021	0	0	0.043

Потенциалы окисления (в растворе ацетонитрила)				Переходы внутри сайта	
A	C	T	G	C – G	A – T
1.69	1.9	1.9	1.24	0.050	0.034

Перенос заряда между гуанином $G_{5'}$, выполняющим роль донора (d) и гуанином $G_{3'}$, выполняющим роль акцептора (a) может быть описан на основе гамильтониана сильной связи \hat{H} , диагональные элементы которого представляют потенциалы окисления оснований, а недиагональные элементы являются матричными элементами перехода дырки между соседними нуклеотидами (на рисунке 1 возможные переходы дырки показаны отрезками линий) [7]:

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{V}, \quad (1)$$

$$\hat{H}^0 = E_d |d\rangle\langle d| + \sum_{i=1}^{2N} E_i |i\rangle\langle i| + E_a |a\rangle\langle a|,$$

$$\hat{V} = v_{d,1} |d\rangle\langle 1| + v_{a,2N-1} |2N-1\rangle\langle a| + \hat{V}_M,$$

$$\hat{V}_M = \sum_{i \neq j} v_{ij} |i\rangle\langle j|,$$

где $v_{d,1}$, $v_{a,2N-1}$ – матричные элементы перехода между донором (d) и нуклеотидом (1) и между акцептором (a) и нуклеотидом ($2N-1$) соответственно; \hat{V}_M – мостиковый гамильтониан ДНК, в котором v_{ij} – матричные элементы перехода заряда между соседними нуклеотидами; E_d , E_a и E_i – энергии заряда на доноре, акцепторе и i -ом нуклеотиде, соответственно.

Для сравнения кондактансов олигонуклеотида, изображенного на рисунке 1, в случаях $V_1 = V_2 = 0$; $V_1 = V_2 = V$ и $V_1 = V, V_2 = 0$; $V_1 = 0, V_2 = V$ рассмотрим величину p :

$$p = I(u_1, u_2) / I(1, 0) = R_{1,15}^2(u_1, u_2) / R_{1,15}^2(1, 0), \quad (2)$$

где $I(u_1, u_2)$ – величина тока, протекающего вдоль олигонуклеотида. Величины $u_{1,2}$ связаны с управляющими потенциалами $V_{1,2}$ соотношением: $u_{1,2} = 1.06689 \cdot V_{1,2}$, $\hat{R} = (E - \hat{H})^{-1}$ – резольвента, соответствующая гамильтониану (1), $R_{1,15}$ – матричный элемент резольвенты (функция Грина) между C_1 и G_{15} , E – комплексный параметр, действительная часть которого есть энергия туннелирования дырки. Параметры электродов, выполняющих функции донора и акцептора, полагались равными: $E_d = E_a = E_G$, $v_{d,1} = v_{G_5,1}$, $v_{a,15} = v_{a,G_3}$. Другими словами, мы рассматриваем ситуацию, когда энергетические параметры электродов близки к величинам, соответствующим гуанинам. Соответственно, мы полагаем $E_7 = E_{A_7} + V_1$, $E_{10} = E_{A_{10}} + V_2$.

В таблице 2 приводятся результаты вычисления величины p в зависимости от величин u_i , связанных с напряжениями V_i соотношением $u_i = 1.06689 \cdot V_i$ (эВ). Величина E полагалась равной $E = -0.5$ эВ, которая соответствует наилучшему согласию с экспериментальными данными для последовательностей, рассмотренных в [8]. Так как величина p определяет ток вдоль олигонуклеотида, то таблица 2 представляет логический вентиль XOR для кондактанса цепочки, изображенной на рисунке 1.

Таблица 2.

u_1	u_2	p
1	1	0*
1	0	1
0	1	1
0	0	0

$u_{1,2} = 1.06689 \cdot V_{1,2}$ (эВ), * – точное значение равно: $2.888 \cdot 10^{-4}$.

Приведенный нами пример олигонуклеотида, обладающего свойствами логического элемента XOR, не единственный. Подобными свойствами будут обладать ДНК дуплексы, в которых картина интерференции электронных волн, определяющих кондактанс дуплекса будет приводить к логической таблице 2. Не вызывает сомнений, что соответствующим подбором олигонуклеотидов можно реализовать различные логические вентили. Это обстоятельство делает перспективным создание электронных вычислительных систем на основе ДНК.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ, грант № 04-07-90402

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dekker C., Ratner M.A. 2001. *Phys. World*. **14**. 29-33.
2. Лахно В.Д. 2001. *Кластеры в физике, химии, биологии*. Москва-Ижевск: R&C Dynamics. 256 с.
3. Tseng R.J., Tsai C., Ma L., Ouyang J., Ozkan C.S., Yang Y. 2006. *Nature nanotechnology*. **1**. 72-77.
4. Voityuk A.A., Rösch N., Bixon M., Jortner J. 2000. *J. Phys. Chem. B*. **104**. 9740-9745.
5. Jortner J., Bixon M., Voityuk A.A., Rösch N. 2002. *J. Phys. Chem. A*. **106**. 7599-7606.
6. Lewis F.D., Wu Y. 2001. *J. Photochem. Photobiol.* **2**. 1-16.
7. Mujica V., Kemp M., Ratner M.A. 1994. *J. Chem. Phys.* **101**. 6849.
8. Lakhno V.D., Sultanov V.B., Pettitt B.M. 2004. *Chem. Phys. Lett.* **400**. 47-53.

Материал поступил в редакцию 13 ноября 2006 г., опубликован 20 ноября 2006 г.