

Перспективные бионанотехнологии на основе ДНК

В. Д. Лахно

Возможные приложения ДНК в наноэлектронике

ДНК-нанопроволоки

ДНК-нанобиочипы

ДНК-наномоторы

ДНК-позисторы

Туннельные диоды на основе ДНК

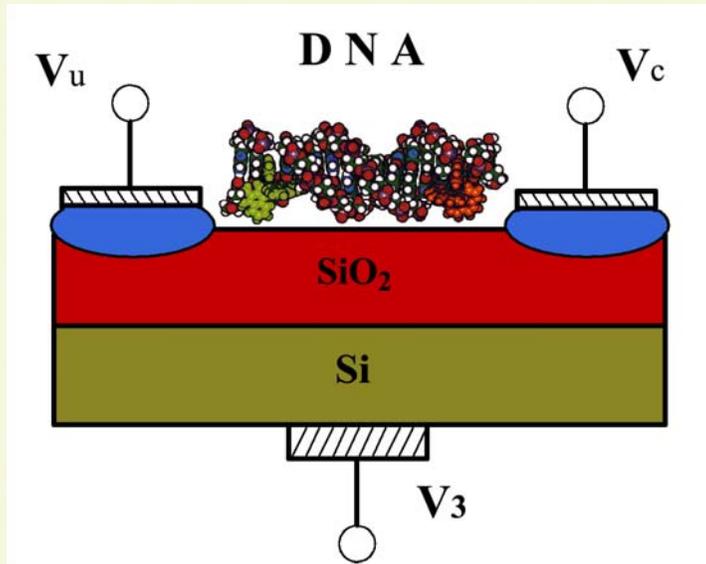
ДНК-транзисторы

ДНК-биосенсоры

Полевой транзистор на основе ДНК

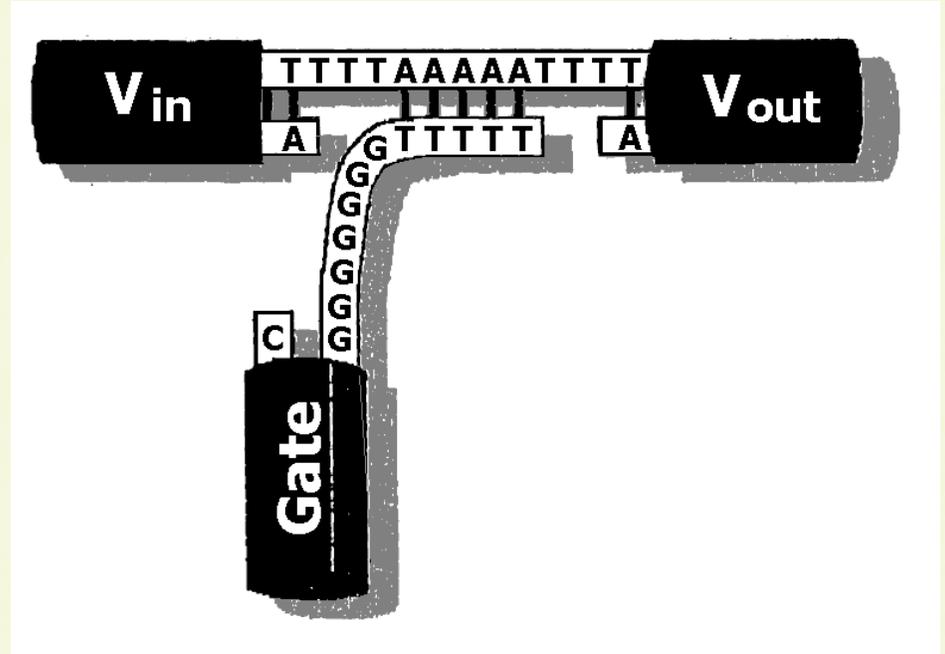
ИСТОК

СТОК



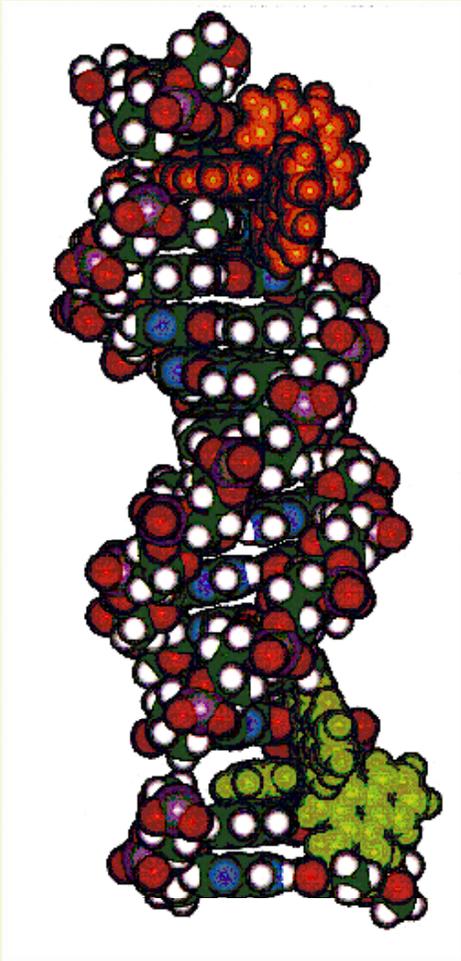
затвор

**K.-H.Yoo, D.H.Ha, et al,
Phys.Rev.Lett., 2001,
87, 198102**



**E. Ben-Jacob et al,
patent, 2007**

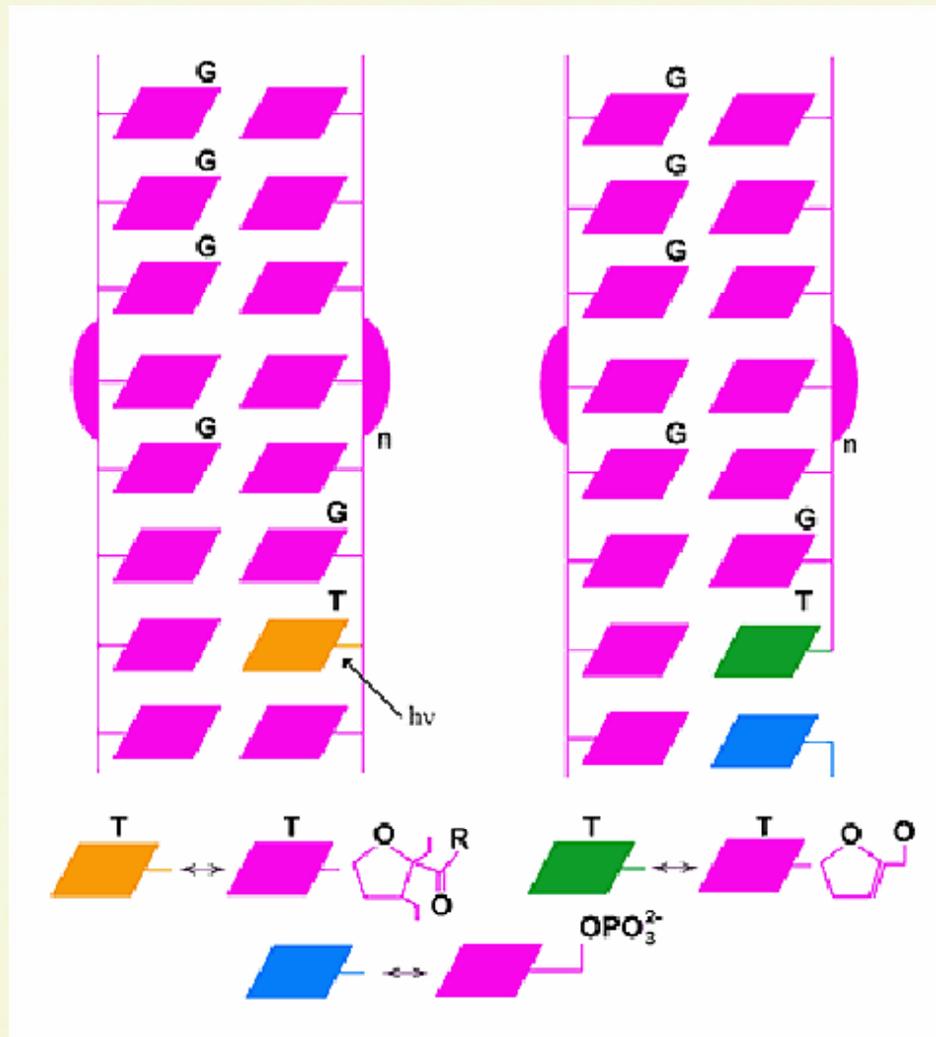
Перенос заряда в олигонуклеотидах



Рутений-родиевые молекулярные комплексы, используемые в качестве доноров и акцепторов в экспериментах по переносу заряда в ДНК.

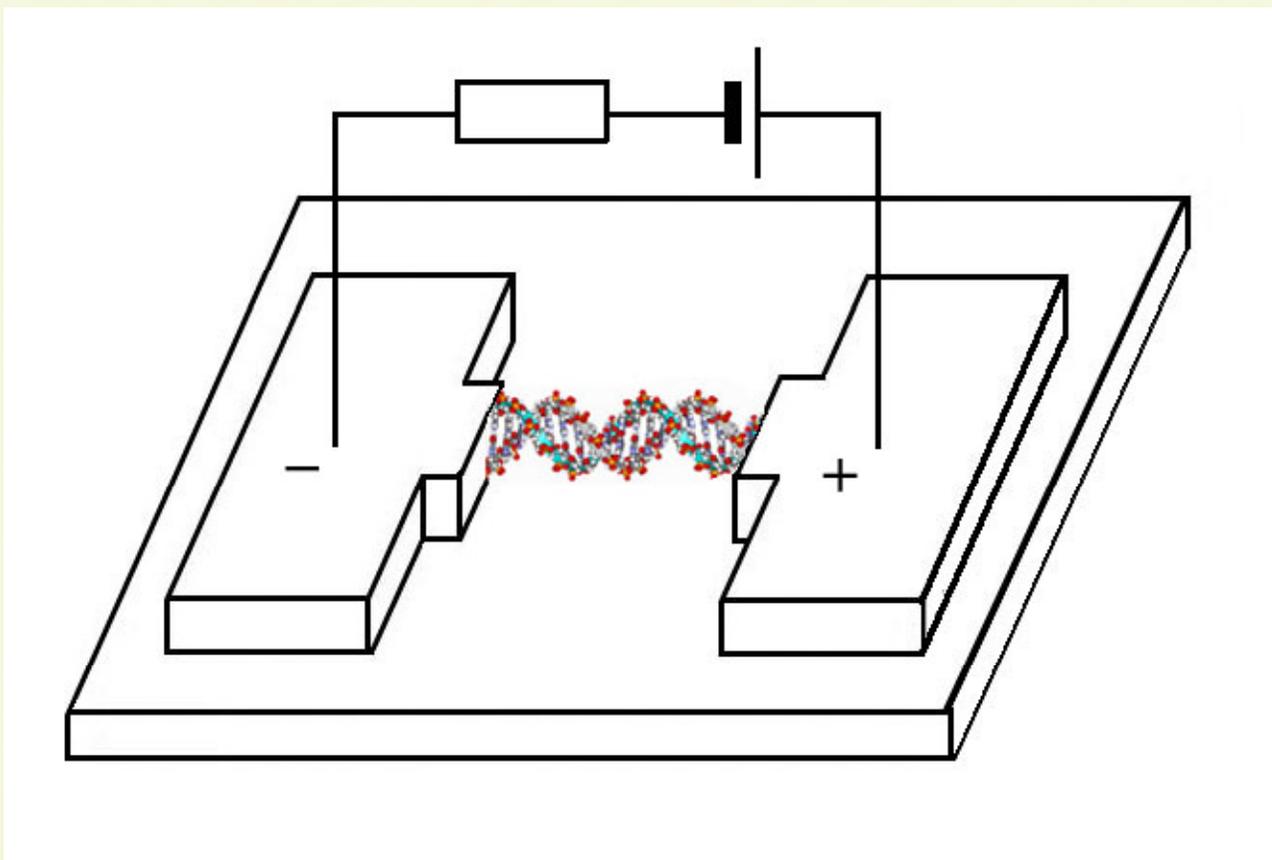
Донор и акцептор ковалентно связаны с фрагментом ДНК, содержащим 15 нуклеотидных пар.

Инжектирование дырки в ДНК



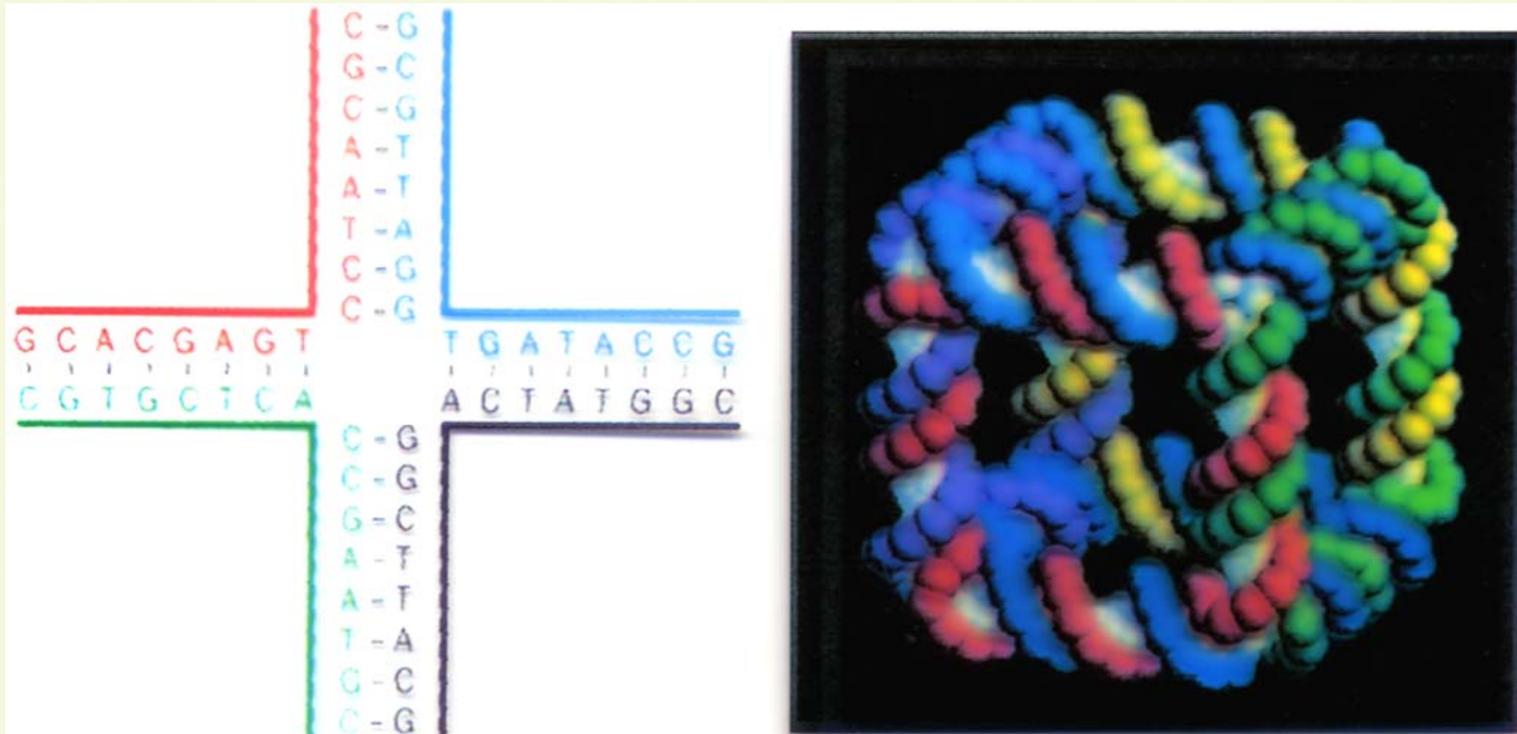
(Giese et al experiments)

Электронный транспорт вдоль молекулы ДНК. Прямые измерения.



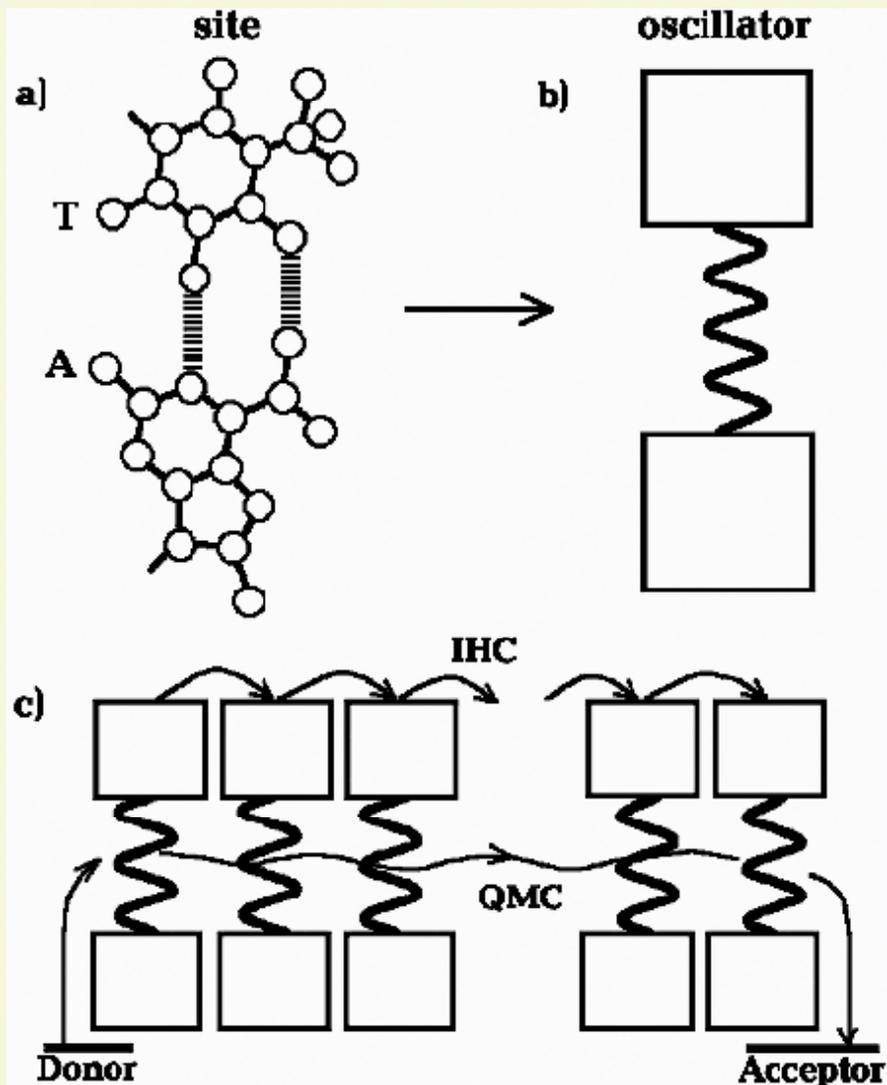
D.Porath et al, Nature, **403**, (2000), 635

Нанотехнологии ДНК

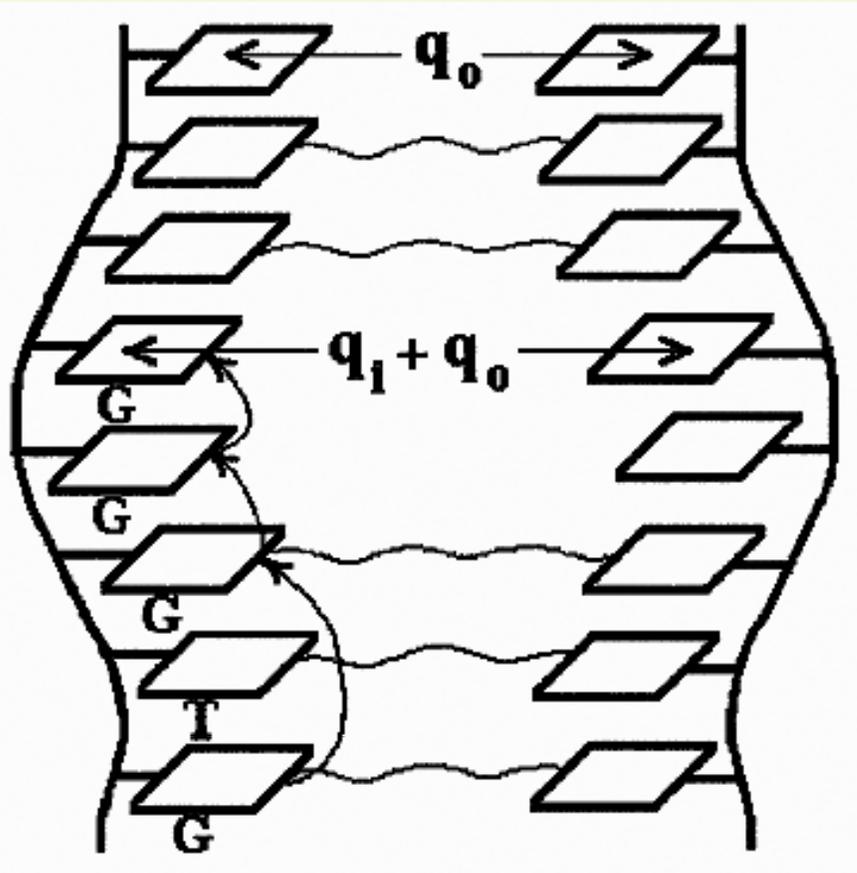


Свойства самосборки двойной спирали ДНК могут быть использованы для создания различных структур (C.Dekker at al., Physics World, 2001)

Уотсон-криковские пары как осцилляторы



Гамильтониан Холстейна



$$H_h = \sum_i^N \alpha_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i,j}^N v_{ij} |i\rangle \langle j| + \sum_i^N \alpha'_i q_i |i\rangle \langle i|$$

$$H_{osc} = \sum_i^N \frac{p_i^2}{2M_i} + \sum_i k_i \frac{q_i^2}{2}$$

Общий подход для расчета подвижности при различных температурах

Уравнения движения для гамильтониана Холстейна

$$i\hbar \frac{db_n}{dt} = \alpha' q_n b_n + v(b_{b+1} + b_{n-1})$$

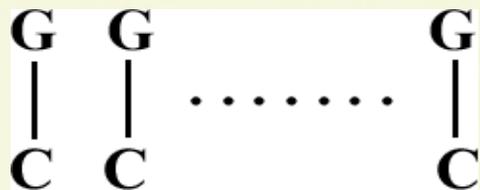
$$M \frac{d^2 q_n}{dt^2} = -\gamma_f \frac{dq_n}{dt} - k q_n - \alpha' |b_n|^2 + A_n(t)$$

$$\langle A_n(t) \rangle = 0 \quad \langle A_n(t) A_m(t+t') \rangle = 2T \gamma_f \delta_{nm} \delta(t')$$

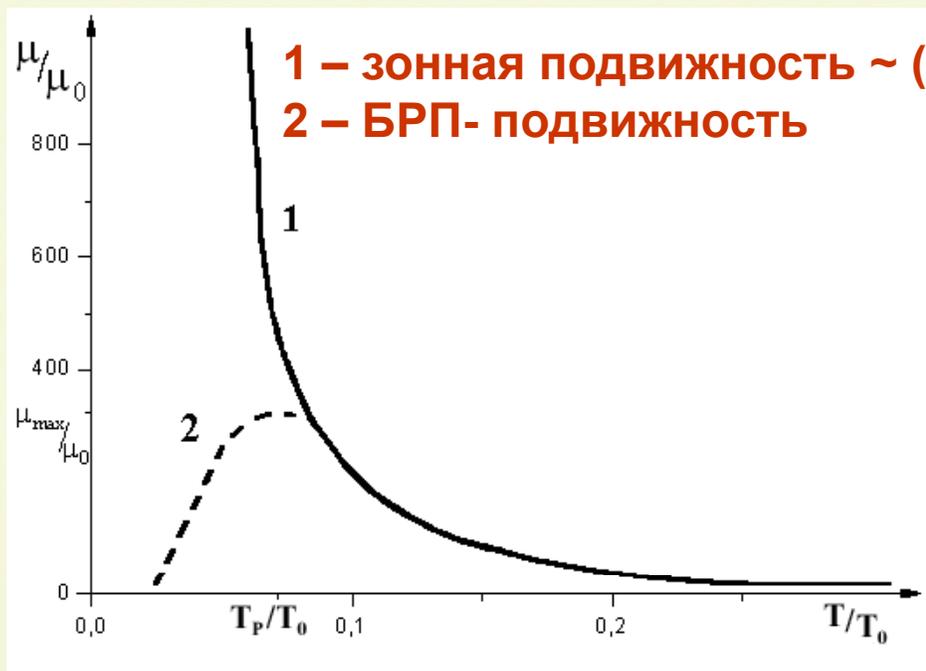
$$\mu = \frac{e}{2T} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^2 \int_0^{\infty} \langle x^2(t) \rangle \exp(-\varepsilon t) dt \quad x^2(t) = a^2 \sum_n n^2 |b_n(t)|^2$$

Температурная зависимость подвижности дырок в (PolyG / PolyC)

$$\nu = 0,084 \text{ eV}, \quad \alpha' = 0,13 \text{ eV} / \text{\AA},$$



$$\omega = \sqrt{K / M} = 10^{12} \text{ sec}^{-1}, \quad \omega' = \gamma_f / M = 6 \cdot 10^{11} \text{ sec}^{-1}$$



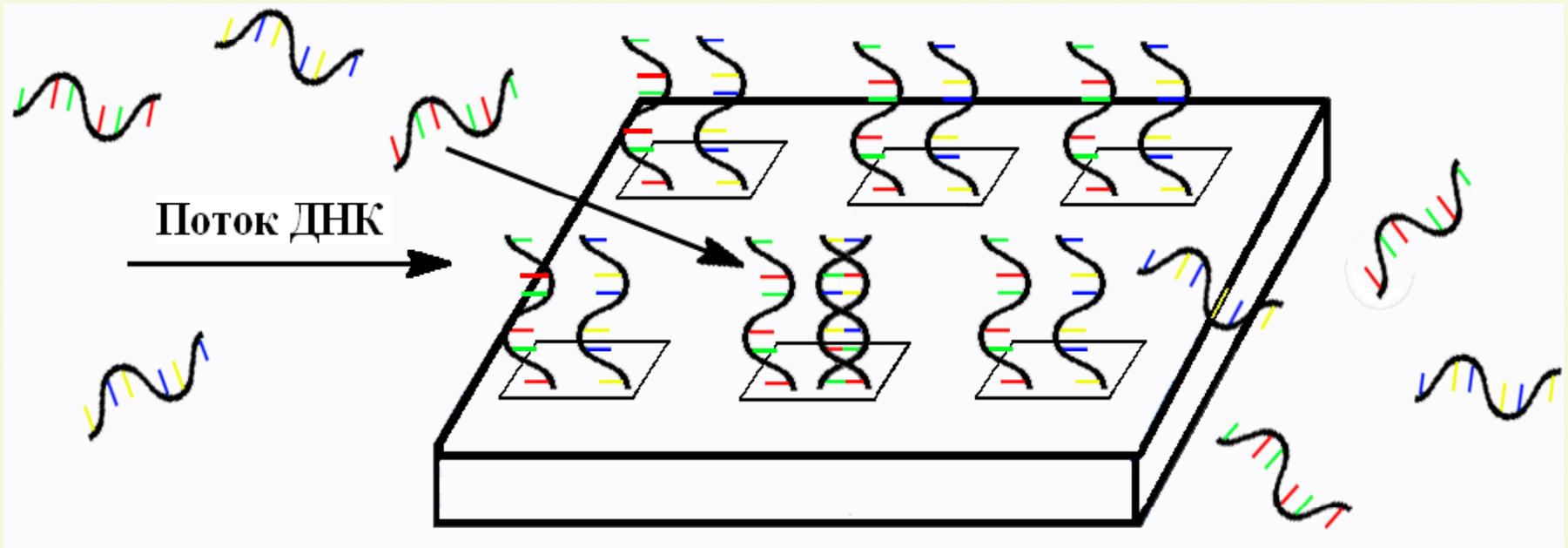
$$\hbar\omega \approx 7,7 \text{ K}, \quad T_P \approx 20 \text{ K},$$

$$\mu_{\text{max}} \approx 1500 \text{ cm}^2 / \text{V sec},$$

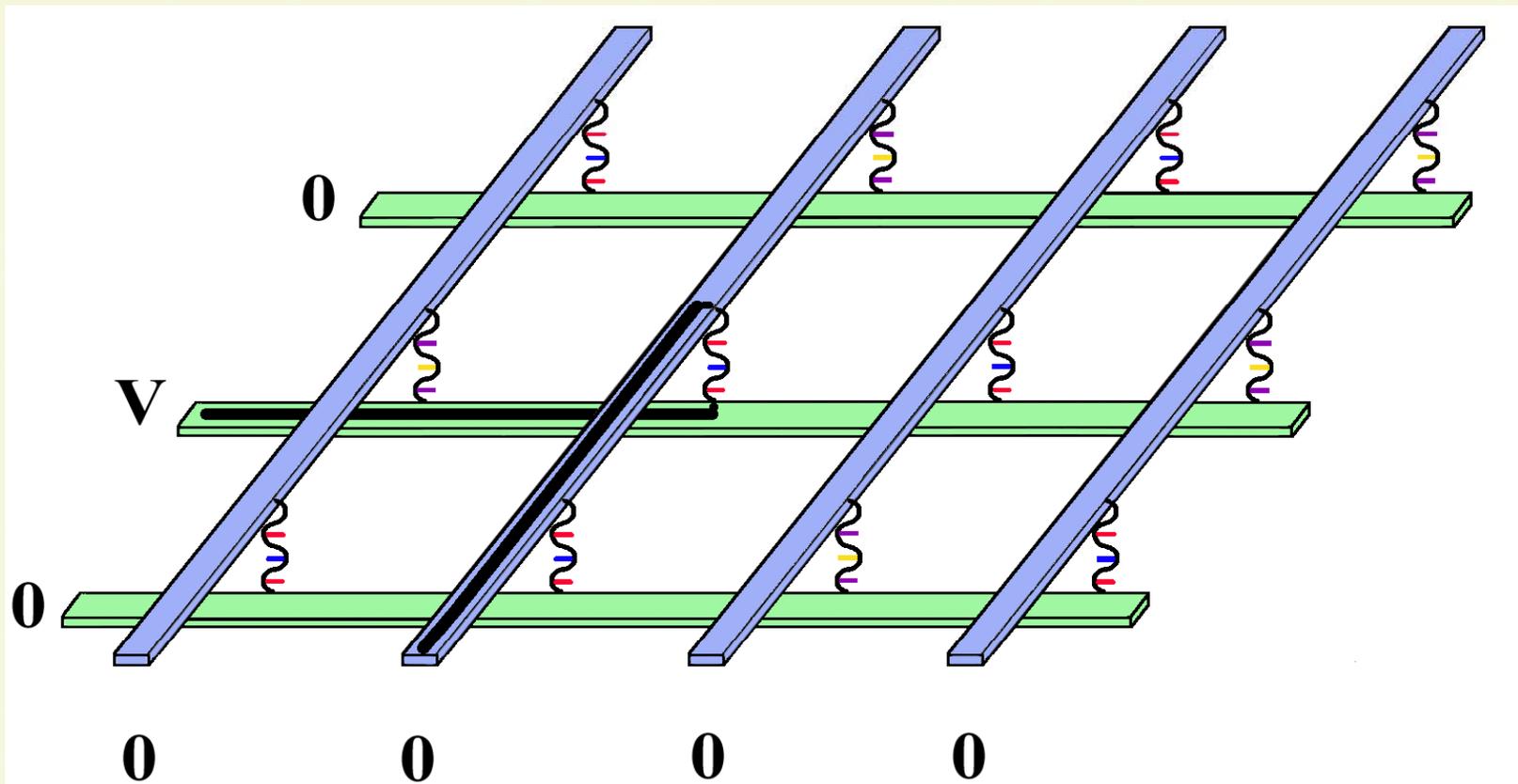
$$\mu_0 = 2,87 \text{ cm}^2 / \text{V sec} -$$

подвижность дырки
при $T_0 = 300 \text{ K}$

Схема действия биочипов



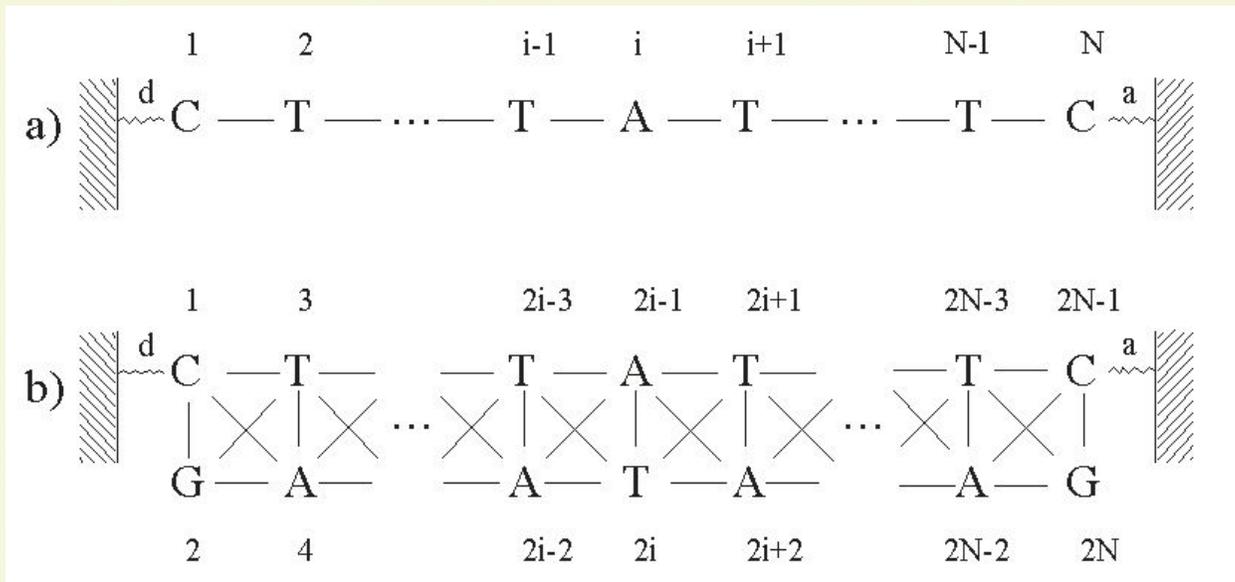
НАНОБИОЧИП



Измеряя ток вдоль выделенного контура, определяем его изменение при гибридизации комплементарной цепи

V. D. Lakhno, V. B. Sultanov. *J. Chem. Theory Comput.* 2007, 3, 703-705

Расчет кондактанса



$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{V},$$

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

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

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

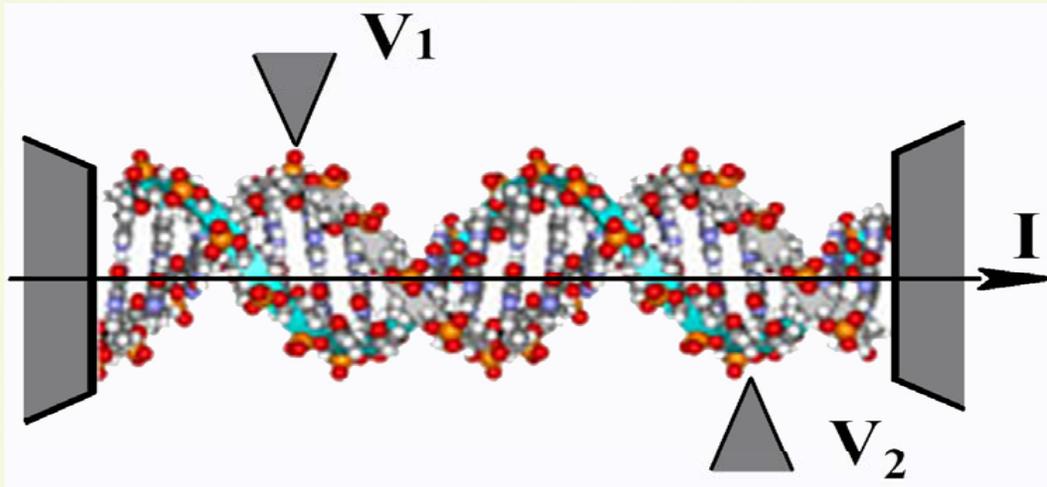
$$f' = \frac{R_{1N}^2}{R_{1,2N-1}^2},$$

где $\hat{R} = (E - \hat{H})^{-1}$

Результаты расчета кондактанса

The results of the calculations				
N	percent $f < 1$	percent of indistinguishable	max(f), sequence	min(f), sequence
8	75.5%	7%	1.3×10^6 , CAAATGTG	3.5×10^{-7} , CCCCCCCG
9	79.9%	5.1%	7.6×10^7 , ACTTGAACC	1.5×10^{-8} , CCCCCCCCG
10	82.4%	3.8%	1.4×10^{10} , CACGCAGGAG	6×10^{-10} , CCCCCCCCCG
11	85%	2.8%	4.2×10^{13} , TGCGCCTTCCC	2.5×10^{-11} , CCCCCCCCCCG

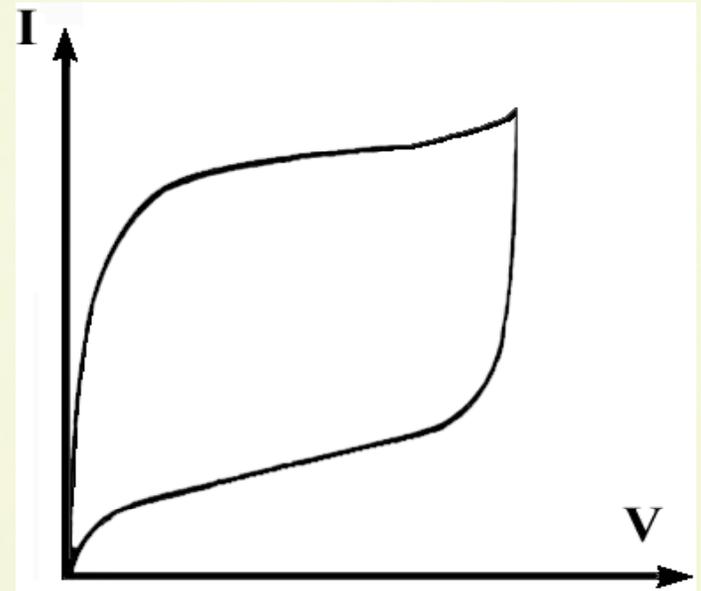
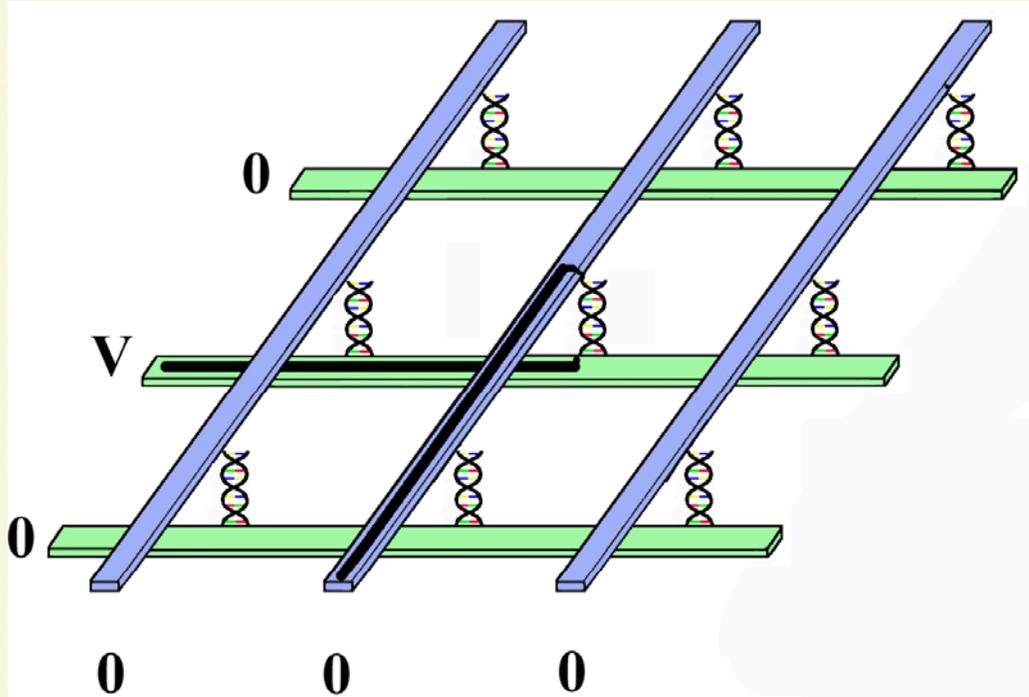
Логический вентиль XOR



В.Д. Лахно, В.Б. Султанов. *Математическая биология и биоинформатика*, 2006, т.1, №1, с.123-126

v1	v2	p
1	1	0*
1	0	1
0	1	1
0	0	0

Электронная память на основе ДНК



Single-Molecule Conductance Measurements of Single- and Double-Stranded DNA Oligonucleotides

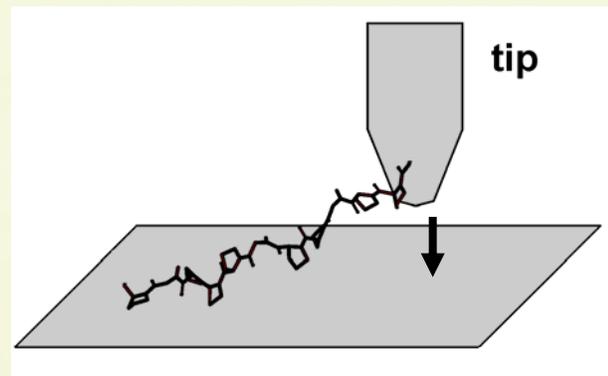
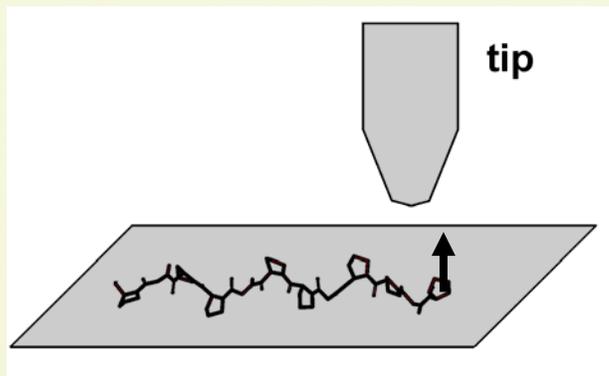
ChemPhysChem v.7 n.1 pp.94-98

H. van Zalinge*, D.J. Schiffrin*, A.D. Bates⁺, W. Haiss*, J. Ulstrup[#],
R.J. Nichols*

* Centre for Nanoscale Science, Chemistry Department, University of Liverpool, United Kingdom

⁺ School of Biological Science, University of Liverpool, United Kingdom

[#] Department of Chemistry, Technical University of Denmark



Digital memory device based on tobacco mosaic virus conjugated with nanoparticles

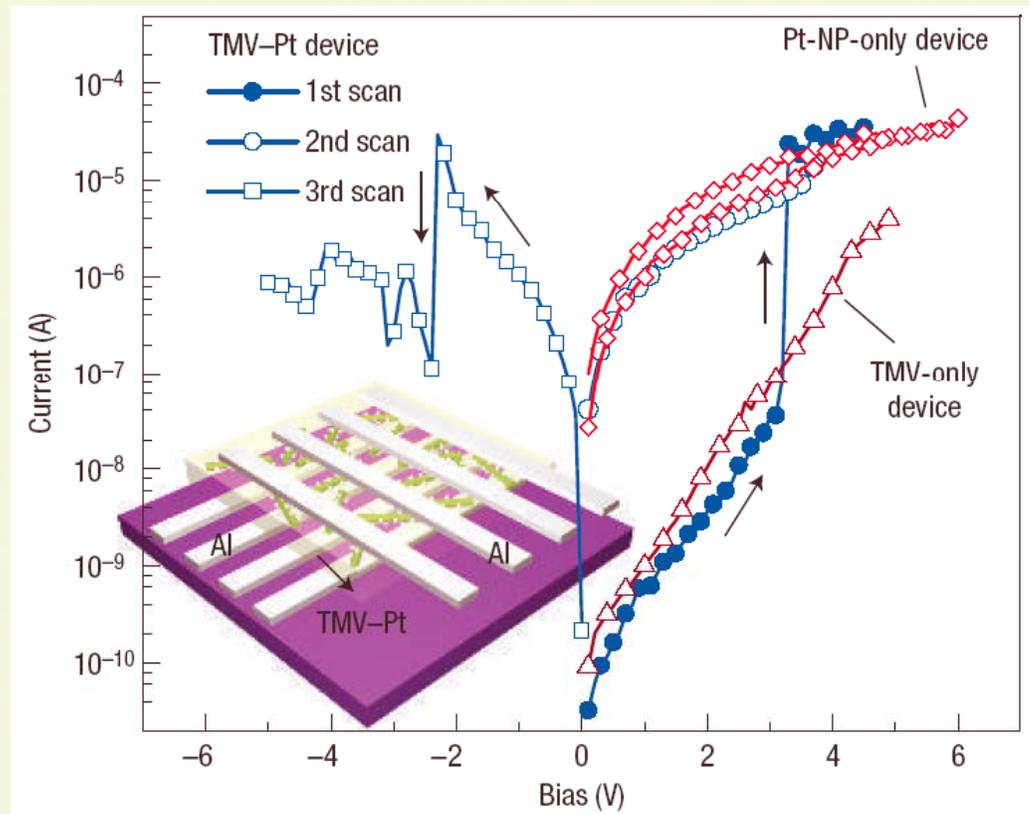
Nature v. 1 Oct. 2006, pp.72-77

R.J. Tseng¹, CH. Tsai², L. Ma¹, J. Ouyang¹, C.S. Ozkan³ Y. Yang¹

¹Department of Materials
Science and Engineering,
University of California_Los
Angeles, USA

²Department of Electrical
Engineering, University of
California_Riverside, USA

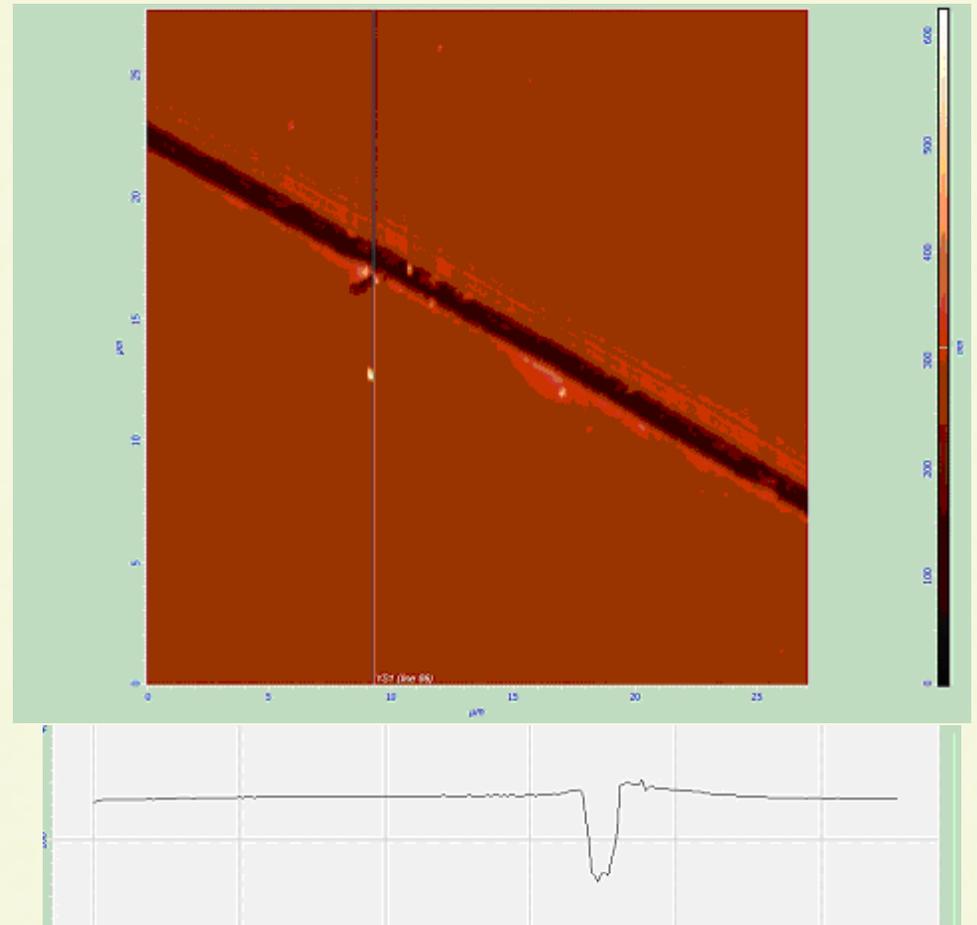
³Department of Mechanical
Engineering, University of
California_Riverside, USA



Изготовление наноэлектродов

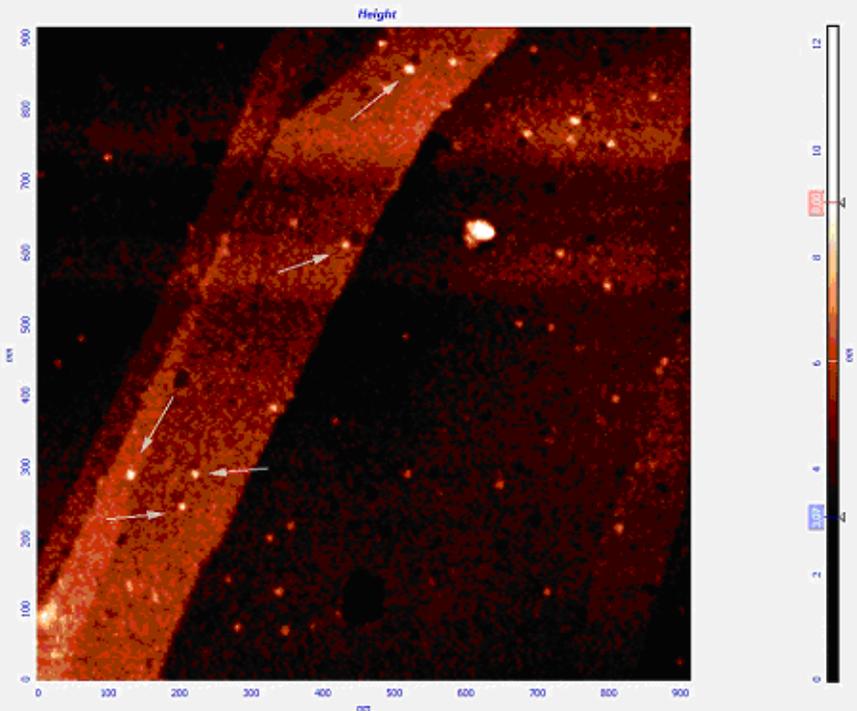


Уширение зазора при
затуплении зонда

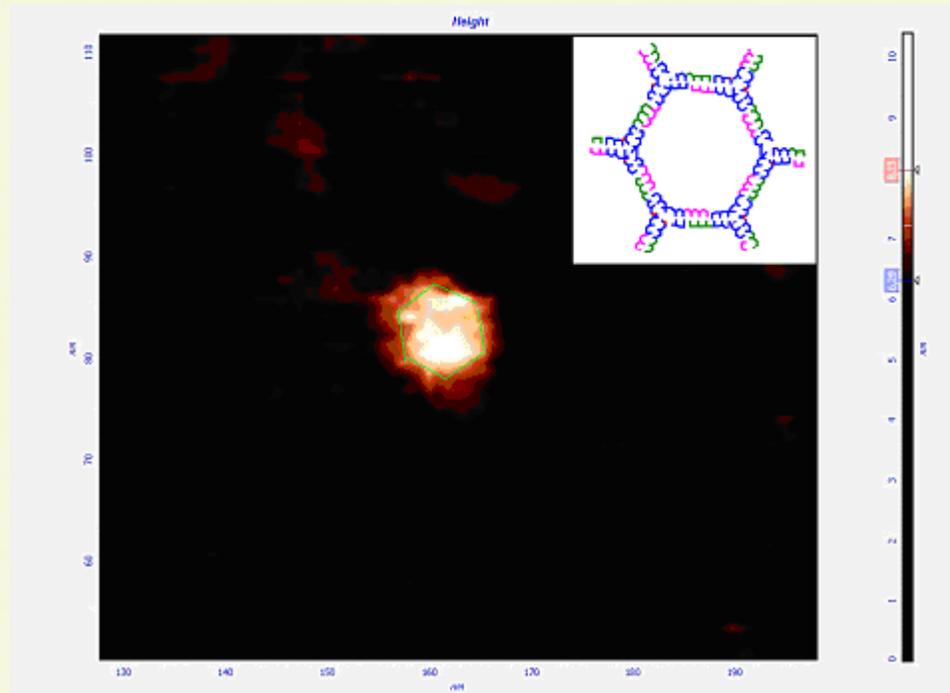


Протяженный зазор, сформированный методом атомно-силовой литографии и профиль сечения.

Самосборка миниколец ДНК



АСМ- изображение миниколец, адсорбированных на подложке



АСМ-изображение миникольца с высоким разрешением

Nano Lett. (on-line) dx.doi.org/10.1021/nl104271s

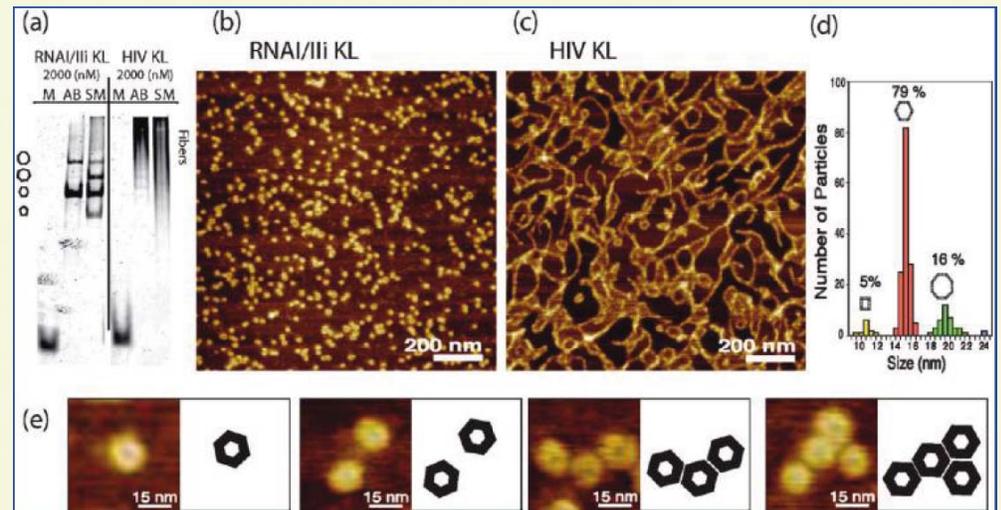
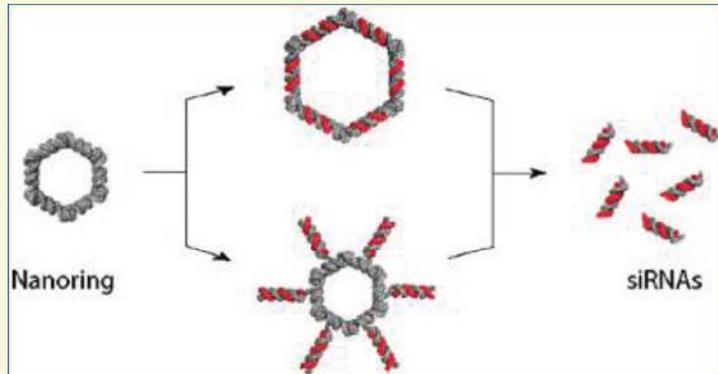
Self-Assembling RNA Nanorings Based on RNAI/II Inverse Kissing Complexes

Wade W. Grabow,[†] Paul Zakrevsky,[†] Kirill A. Afonin,[†] Arkadiusz Chworos,^{†,||} Bruce A. Shapiro,[‡] and Luc Jaeger^{*,†,§}

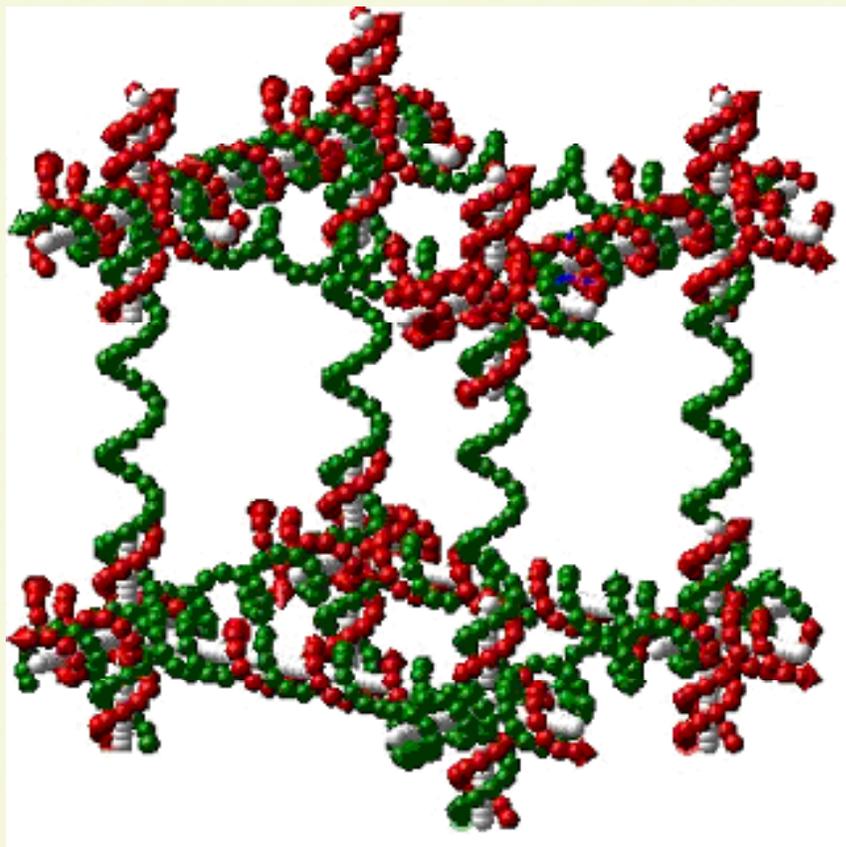
[†]Department of Chemistry and Biochemistry, University of California, Santa Barbara, California 93106-9510, United States

[‡]Center for Cancer Research Nanobiology Program, National Cancer Institute, NCI-Frederick, National Institutes of Health, Frederick, Maryland 21702, United States

[§]Biomolecular Science and Engineering Program, University of California, Santa Barbara, California 93106, United States



Атомная модель элементарной ячейки нанобиочипа



ВЫВОДЫ

- ДНК является перспективным биологическим материалом для наноэлектроники
- необходимо сосредоточить усилия на развитии технологии манипулирования отдельной молекулой ДНК
- работам по освоению этой технологии необходимо придать статус прикладных разработок.