

第一原理電子状態計算によるDNAのエネルギーバンドの塩基配列依存性と超伝導



参加者 川井弘之(放送大学教養)、大野義章(新潟大学理学部)

概要

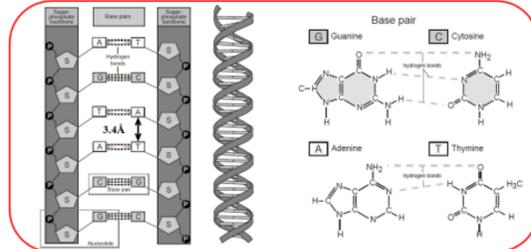
- DNAが超伝導？
- 本研究の動機
- 第一原理計算の先行研究
- 我々の結果
- まとめ

本研究の動機

Kasumovの論文以降、実験・理論の両面から多くの研究が行われたが、超伝導を証明できず、2010年以降はDNA超伝導についての論文が出なくなった

DNAは1次元電子系と見なせるので、1次元の朝永-Luttinger液体論に基づいてどのような塩基配列のDNAが超伝導になりうるかを理論的に明らかにしたい。そのために第一原理計算に基づくDNAの電子状態が必要だ。

Deoxyribonucleic Acid (DNA)



計算手法

- 第一原理計算ソフトウェアOpenMXを使用。数値局在基底、擬ポテンシャル法を用いている。
- GGA汎関数を用いてO(N)法を使った最急降下法による構造最適化を行い、バンド計算も同様の汎関数を用いた。
- 波数分割は $k=1 \times 1 \times 1$ で行った(系が巨大なためブリルアンゾーンがほとんど広がらないこと、O(N)法による計算を行うにはこの必要があるため。)
- 基底は
 - H s3p2
 - C s2p2d1
 - N s3p3d2f1
 - O s3p3d2
 - P s4p3d3f2
- を用いた。
- 計算時間は主に構造最適化にかかり、17280ノード時間のうちほとんどを費やした。使用メモリは50GBほどで、当初の予定通り計算時間がネックとなった。Reedbush-Uシステムを利用した。

DNAが超伝導？

2001年、KasumovらはDNAが超伝導を示すことを報告した。しかし、ドーパ量や塩基配列の情報などは分かっていない。

A. Yu. Kasumov et al. SCIENCE 291,280 (2001)

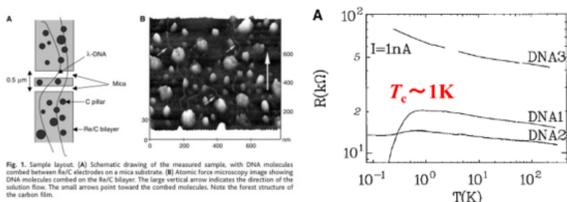
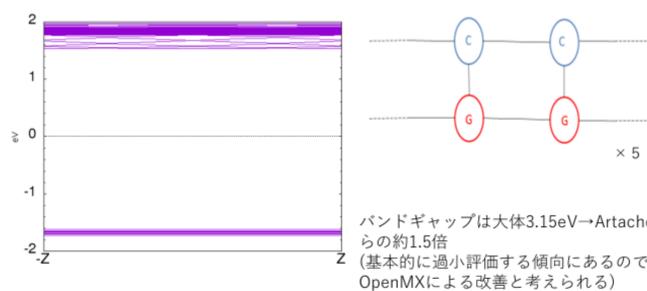
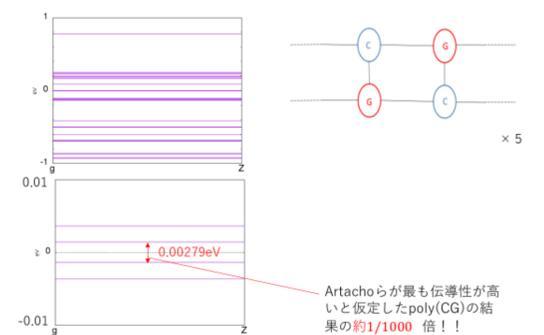


Fig. 1. Sample layout. (A) Schematic drawing of the measured sample, with DNA molecules oriented between Au/C electrodes on a mica substrate. (B) Atomic force microscopy image showing DNA molecules oriented on the Au/C bilayer. The large vertical arrow indicates the direction of the isolation flow. The small arrow points toward the oriented molecules. Note the forest structure of the carbon film.

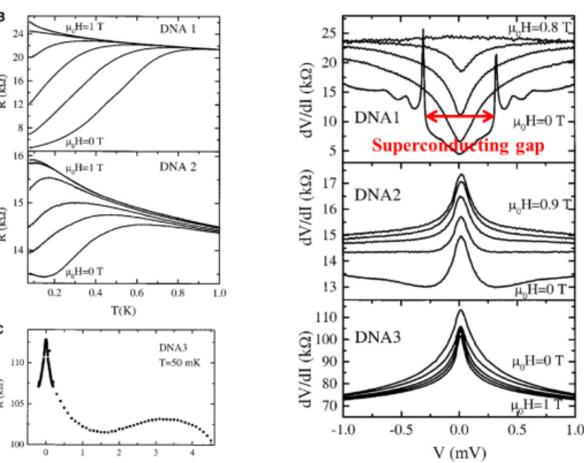
計算結果-poly(CG)



計算結果-poly(CG-GC)

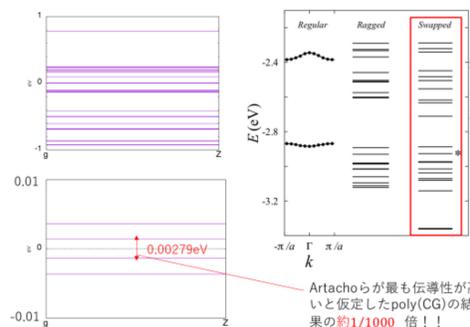


新規



A. Yu. Kasumov et al. SCIENCE 291,280(2001)

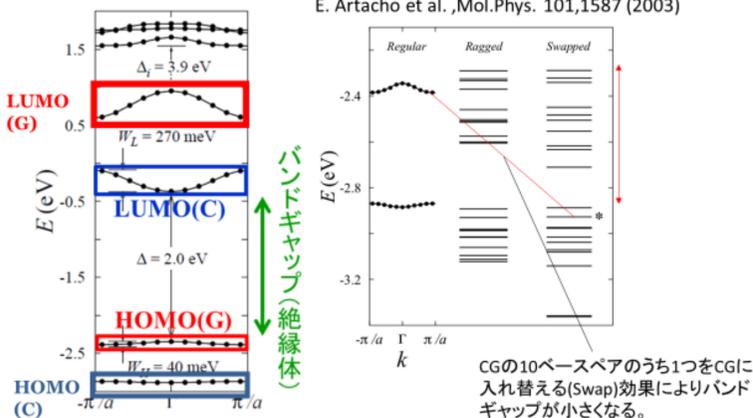
計算結果-poly(CG-GC)



新規

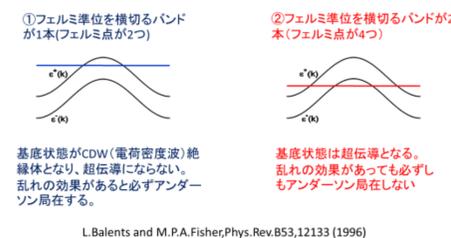
第一原理計算によるDNAのエネルギーバンド(poly(CG))

E. Artacho et al., Mol.Phys. 101,1587 (2003)



1次元電子系の朝永-Luttinger液体論

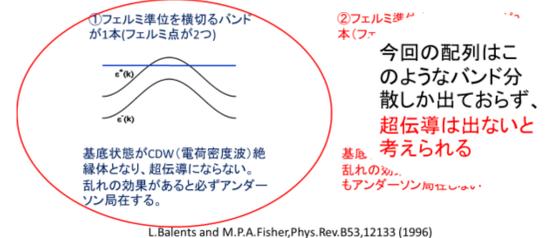
1次元電子系のUniversal Theory 種々の物理量が非整数のべき乗で変化する



L.Balents and M.P.A.Fisher,Phys.Rev.B53,12133 (1996)

1次元電子系の朝永-Luttinger液体論

1次元電子系のUniversal Theory 種々の物理量が非整数のべき乗で変化する



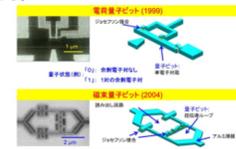
L.Balents and M.P.A.Fisher,Phys.Rev.B53,12133 (1996)

まとめ

- DNAの電子状態を配列ごとに第一原理計算を行い、比較した。
- poly(CG-GC)では、従来最も伝導性が高いと予想されていたpoly(CG)より2桁ほど小さいバンドギャップとなり、これまでの定説を覆した。
- 今後の課題として、今回の配列poly(CG-GC)での伝導性を具体的に議論すること、またpoly(CG-GC)では超伝導は出ないと考えられるのでそれに手を加えた配列で超伝導をまた探索する。

(参考)DNAの超伝導配列の特定の意義

- ①電子デバイスへの応用
超伝導体は常温で金属でもある場合が多いので分子スケールのワイヤーとしての応用が期待される。
- ②超伝導量子ビットの設計
今アルミニウムが多く使われているがDNAで作ることが出来ればより安価に、容易に作る事ができる。



www.pref.okayama.jp>act>qit17>ppt
量子コンピューターとそのデバイス