

# 界面耦合对 DNA 分子电荷输运性质的影响<sup>\*</sup>

孟宪兰<sup>1)</sup> 高绪团<sup>3)</sup> 渠 朕<sup>1)</sup> 康大伟<sup>1)</sup> 刘德胜<sup>1)†</sup> 解士杰<sup>1)</sup>

1) 山东大学物理学院, 晶体材料国家重点实验室, 济南 250100)

2) 济宁学院物理系, 曲阜 273155)

3) 山东理工大学物理学院, 淄博 255049)

(2007 年 12 月 11 日收到, 2008 年 4 月 18 日收到修改稿)

在三维紧束缚模型下, 采用传递矩阵的方法研究了不同界面耦合对 DNA 分子电荷输运性质的影响. 结果表明, 界面耦合理想时, 透射率和电子定域长度都很大, 分子呈现出良好的导电性; 反之, 透射率和电子定域长度减小, 分子呈现出较差的导电性. 当分子与金属电极之间理想耦合时, 从伏安特性上可以看出,  $\text{poly}(\text{dG})\text{-poly}(\text{dC})$  DNA 分子的开启电压小于  $\text{poly}(\text{dA})\text{-poly}(\text{dT})$  DNA 分子的开启电压, 并且在相同的偏压下前者的电流值要大于后者. 因此,  $\text{poly}(\text{dG})\text{-poly}(\text{dC})$  DNA 分子的导电性优于  $\text{poly}(\text{dA})\text{-poly}(\text{dT})$  DNA 分子的导电性.

关键词: 界面耦合, 透射率, 定域长度, 导电性

PACC: 8715, 7210, 7340

## 1. 引 言

近年来, 随着纳米科技和分子电子学的发展, 包含生物遗传基因密码的 DNA 分子已经引起了人们的广泛关注, 其独特的电子输运性能为其在生物、材料和信息领域的应用带来了许多潜在的应用前景<sup>[1,2]</sup>. 因此研究 DNA 分子的导电性, 了解 DNA 分子的电荷输运机制, 对于把 DNA 作为分子器件、理解 DNA 突变、修复受损的 DNA 都有重要的意义.

自 1953 年 Waston 和 Crick<sup>[3]</sup>发现 DNA 的双螺旋结构不久, 1962 年 Eley 等<sup>[4]</sup>认为 DNA 分子双螺旋结构中的碱基堆积所造成的  $\pi$ - $\pi$  电子相互作用将会导致 DNA 分子的导电行为. 因为相邻碱基对间  $\pi$  电子的相互作用形成扩展的大  $\pi$  电子轨道, 为电荷的输运提供了通道. 这为 DNA 分子的导电性研究提供了有力的理论基础.

近年来, 人们对 DNA 分子的导电性进行了大量的实验和理论研究, 取得了令人瞩目的成果. 实验上, 关于 DNA 呈现导体<sup>[5]</sup>、半导体<sup>[6]</sup>、绝缘体<sup>[7]</sup>甚至是超导体<sup>[8]</sup>的工作均有报道. 理论上, 人们对 DNA 分子的导电性也进行了深入的研究, 但一般都把

DNA 分子看作准一维导线, 采用简单的一维紧束缚模型进行研究. 实际的 DNA 分子具有空间双螺旋结构, 实验和理论研究都证明 DNA 分子的空间结构对其电荷输运性质有着重要的影响<sup>[9-13]</sup>. 文献 [9, 10] 研究了空间结构涨落对 DNA 分子的电荷输运性质的影响. Hennig 等<sup>[11-13]</sup>建立了三维紧束缚模型, 并利用该模型研究了 DNA 分子中的极化子及其输运性质. 本文将考虑 DNA 分子的空间双螺旋结构, 建立描述 DNA 分子的三维紧束缚模型, 并利用该模型研究 DNA 分子的电荷输运性质.

实验上人们对 DNA 分子导电性的测量得出了不一致、甚至是相反的结论, 这与很多因素有关, 既有内部因素, 如分子自身结构的复杂性, 也有很多外界因素, 如温度、湿度、杂质以及 DNA 分子和电极之间的接触等<sup>[14-16]</sup>. 其中分子与金属电极之间的接触情况对分子导电性的直接测量所造成的影响是不容忽视的. 人们采用不同的方法对 DNA 分子导电性进行直接测量, 这就涉及到如何把被测样品放在电极两端的问题. 在 Zhang 等<sup>[7]</sup>进行的实验中, 通过金-硫醇化学键将有机分子(如 DNA 分子)粘在金属电极两端. 目前人们普遍认为 DNA 碱基对层层堆积形成的大  $\pi$  电子体系构成了电荷转移的通道. 将

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 10574082)和山东省自然科学基金(批准号: Z2005A01)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: liuds@sdu.edu.cn

DNA 分子碱基通过金-硫醇键直接束缚在金属电极两端的方法,提供金属电极和  $\pi$  电子体系之间最直接的导电通道.在 Yoo 等<sup>[17]</sup>进行的实验中,DNA 分子与金属电极之间的电接触使用的是静电俘获的方法.把 DNA 分子俘获在相距 20 nm 的 Au/Ti 电极之间.总之,在各种不同的实验中,人们对不同的 DNA 样品进行导电性的直接测量总要涉及到界面接触的问题.当分子与金属电极接触不理想时,由于分子与金属电极接触失配而屏蔽了对 DNA 分子自身导电性的测量.只有当分子与金属电极接触良好时,才能确保所测得的导电性是 DNA 分子本身的属性.因此,研究 DNA 分子与金属电极之间的界面耦合是非常必要而且是有意义的.本文中我们就实验上的界面接触问题进行了理论探讨,为直接测量 DNA 分子导电性时注重分子与电极之间的接触设计提供了理论上的指导.

## 2. 模型与方法

考虑到 DNA 分子是柔性链,碱基相对位置易受外界环境的影响而偏离平衡位置,影响其电荷输运.我们所建立的三维模型充分考虑了 DNA 分子的双螺旋结构,能够更好地描述碱基相对位置的起伏变化对 DNA 分子电荷输运性质的影响.在所建立的物理模型中,鉴于 DNA 分子的物理结构,为研究问题的方便,我们忽略了其具体的化学结构,把每一个碱基对(碱基)看作一个格点.考虑到 DNA 分子的骨架是通过共价键结合,碱基则是通过氢键结合成碱基

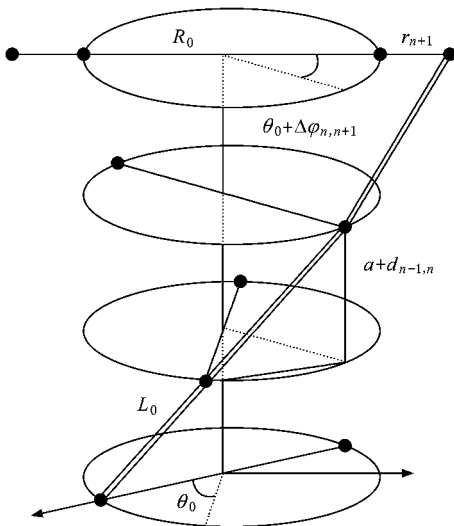


图 1 DNA 双螺旋结构示意图(碱基由圆点表示)

对,所以我们假定相邻碱基对之间对应的骨架长度  $L_0$  不变,氢键键长可以改变,相邻碱基对之间的夹角(螺旋角)也是可以变化的,即碱基被限制在垂直于螺旋主轴的平面内运动,如图 1 所示.图 1 中的  $R_0$ ,  $\beta_0$  和  $a$  分别是碱基对等距离分布时的螺旋半径、相邻碱基对之间的螺旋角和距离, $r_{n+1}$  是氢键键长的改变量  $\Delta\varphi_{n,n+1} = \varphi_{n+1} - \varphi_n$  是相邻碱基对之间螺旋角的改变量.

从物理上考虑,氢键键长的变化会引起电子格点在位能的变化,相邻碱基对之间距离的变化则会引起电子跃迁积分的变化,从而影响 DNA 分子的电子结构和电荷输运性质.因此,我们建立下面的三维紧束缚模型来描述 DNA 分子.哈密顿量为

$$H = H_{\text{el}} + H_{\text{rad}} + H_{\text{twist}}, \quad (1)$$

$$H_{\text{el}} = \sum_{n,s} (\Delta_n + \beta r_n \chi c_{n,s}^+ c_{n,s} - N_e / N) - \sum_{n,s} t_0 (1 - \alpha d_{n,n+1}) \times (c_{n,s}^+ c_{n+1,s} + c_{n+1,s}^+ c_{n,s}), \quad (2)$$

$$H_{\text{rad}} = \sum_n \frac{1}{2} M_n (r_n^2 + \Omega_r^2 r_n^2), \quad (3)$$

$$H_{\text{twist}} = \sum_n \frac{1}{2} J_\theta (\dot{\varphi}_{n+1}^2 + \Omega_\theta^2 \Delta\varphi_{n,n+1}^2), \quad (4)$$

式中

$$d_{n,n+1} = \{ L_0^2 - [(R_0 + r_n)^2 + (R_0 + r_{n+1})^2 - 2(R_0 + r_n)(R_0 + r_{n+1}) \cos(\theta_0 + \Delta\varphi_{n,n+1})] \}^{1/2} - a, \quad (5)$$

$$L_0 = \sqrt{a^2 + 4R_0^2 \sin^2(\theta_0/2)}. \quad (6)$$

(5) 式的一级近似为

$$d_{n,n+1} \approx -R_0 [(1 - \cos\theta_0) \chi (r_n + r_{n+1}) + R_0 \Delta\varphi_{n,n+1} \sin\theta_0] a. \quad (7)$$

这里  $H_{\text{el}}$  是电子部分哈密顿量,  $H_{\text{rad}}$  是碱基沿氢键方向振动的哈密顿量,  $H_{\text{twist}}$  是碱基对转动的哈密顿量,  $c_{n,s}^+$  和  $c_{n,s}$  是自旋为  $s$  的电子在格点  $n$  处的产生和湮没算符;  $\Delta_n$  是格点在位能; 参数  $\beta$  是氢键弹性常数; 参数  $\alpha$  是电子-晶格耦合常数, 表示晶格畸变对电子跃迁积分的影响程度;  $N_e$  是 DNA 分子中的巡游电子数,  $N$  是 DNA 分子中的碱基对数(格点数),  $N_e/N$  是巡游电子数密度, 即平均每个格点上的巡游电子数, 满占据时  $N_e/N = 2$ ;  $t_0$  是碱基对等距离排列时的电子跃迁积分;  $d_{n,n+1}$  是沿螺旋轴方向相邻碱基对之间距离的改变量,  $d_{n,n+1}$  是  $r_n$  和  $\Delta\varphi_{n,n+1}$  的函数;  $M_n$  是碱基对的约化质量;  $J_\theta$  是碱基对的约化

转动惯量  $\mu\Omega_r$  和  $\Omega_\theta$  分别是氢键振动频率和扭转角转动频率. 参数的取值如下<sup>[11]</sup>:  $R_0 = 1 \text{ nm}$ ,  $\theta_0 = 36^\circ$ ,  $a = 0.34 \text{ nm}$ ,  $J_n = 4.982 \times 10^{-45} \text{ kgm}^2$ ,  $M_n = 4.982 \times 10^{-25} \text{ kg}$ ,  $\Omega_r = 6.252 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ ,  $\Omega_\theta = 0.744 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ .

由于碱基对之间氢键键长起伏变化不固定, 所以氢键弹性常数  $\beta$  不固定, 电子-晶格耦合常数  $\alpha$  也是不固定的, 但是为了保证氢键振动和扭转角转动为简谐运动, 这就要求  $\alpha < 0.2 \text{ nm}^{-1}$ ,  $\beta < 10 \text{ eV/nm}$ , 在这里我们取  $\alpha = 0.1 \text{ nm}^{-1}$ ,  $\beta = 9 \text{ eV/nm}$ .

在本文的模型中存在两个自由度  $r_n$  和  $\Delta\varphi_{n,n+1}$ . 静态时  $\dot{r}_n = 0$ ,  $\dot{\varphi}_n = 0$ . 我们假设电子满占据时为 DNA 分子基态, 基态时通过计算得到  $\{r_n\} = 0$ ,  $\{\Delta\varphi_{n,n+1}\} = 0$ . 但是在外界环境的影响下, 这两个自由度都将是起伏变化的, 本工作中我们着重考虑

的是碱基对间氢键键长的起伏变化  $\{r_n\}$ , 故把  $\{\Delta\varphi_{n,n+1}\}$  看作一个常量, 而把  $\{r_n\}$  作为一个独立的随机变量, 取其均匀分布为  $r_n \in [-w, w]$ , 其中  $w = 0.005 \text{ nm}$ .

一般情况下, 常用透射率  $T(E)$  和电子定域长度来描述分子的导电性. 透射率的大小反应了分子导电性的强弱, 透射率大则说明分子的导电性好, 反之, 则说明分子的导电性差. 电子定域长度就是电子波函数局限的范围, 简言之, 就是系统中电子能够“移动”的最大距离. 定域长度越长, 说明电子态越扩展, 则分子的导电性越好; 反之, 说明电子态越局域, 则导电性越差.

假设 DNA 分子联接在两个半无限大的金属电极之间, 电子通过 DNA 分子从左边的电极到达右边的电极, 通过传递矩阵得出透射率公式如下<sup>[16]</sup>:

$$T(E) = \frac{4 - \frac{(\Delta_m - E)^2}{t_m^2}}{2 + \sum_j P_{ij}^2 + \frac{(\Delta_m - E)}{t_m} (P_{11} - P_{22}) (P_{12} - P_{21}) - \frac{(\Delta_m - E)^2}{t_m^2} (P_{12} P_{21} + 1)}, \quad (8)$$

式中

$$P = \prod_{n=N}^1 M_n, \quad (9)$$

$$M_n = \begin{pmatrix} -\frac{E - (\Delta_n + \beta r_n)}{t_{n,n+1}} & -\frac{t_{n-1,n}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

这里  $(\Delta_n + \beta r_n)$  和  $\Delta_m$  分别是 DNA 分子中格点在位能和金属中格点在位能,  $t_{n,n+1}$  和  $t_m$  分别是 DNA 分子中的电子跃迁积分和金属中的电子跃迁积分,

$$t_{n,n+1} = t_0(1 - \alpha d_{n,n+1}).$$

得到透射率后, 利用下式计算电子定域长度  $\lambda(E)$ <sup>[18]</sup>:

$$\lambda(E) = \frac{-2N}{\ln(T_N(E))}. \quad (10)$$

从透射率出发, 利用 Landauer-Büttiker 公式<sup>[19]</sup>可计算分子的伏安特性,

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T_N(E) [f_L(E) - f_R(E)] dE. \quad (11)$$

这里  $f_L, f_R$  表示左、右电极的费米分布函数,

$$f_{L,R} = \{\exp[(E - \mu_{L,R})/k_B T] + 1\}^{-1},$$

式中  $\mu_{L,R}$  为左、右电极的化学势

$$\mu_L = E_F + 0.5 \text{ eV},$$

$$\mu_R = E_F - 0.5 \text{ eV},$$

其中  $V$  表示外加电压,  $E_F$  为体系的费米能.

### 3. 结果及讨论

DNA 分子链可以认为是由两种不同的碱基对组成, 碱基对 A/T(或 T/A) 和碱基对 G/C(或 C/G). 参照文献[20], 选取参数  $\Delta_{G/C} = 0.0 \text{ eV}$ ,  $\Delta_{A/T} = -0.65 \text{ eV}$ ,  $t_{GC}^0 = 0.4 \text{ eV}$ ,  $t_{AA}^0 = 0.2 \text{ eV}$ . 在金属电极中, 我们取  $\Delta_m = 0.0 \text{ eV}$ ,  $t_m = 6 \text{ eV}$ ; 参照文献[21], 我们估算体系的费米能量  $E_F = 1.0 \text{ eV}$ .

#### 3.1. 金属电极与分子界面耦合对 poly(dG)-poly(dC) DNA 分子电荷输运性质的影响

对于由金属电极与 DNA 分子组成的异质结构, 界面相互作用(即界面耦合)对分子导电性的影响是显著的. 这里, 我们取界面耦合处的电子跃迁积分  $t_{\text{couple}} = (t_m + t_{\text{DNA}})\gamma$ .

如图 2 所示, 当  $\gamma = 16$  时,  $t_{\text{couple}} = t_{\text{DNA}}$ , 此时 poly(dG)-poly(dC) 分子的透射率很大, 大部分能量

上的透射率接近于 1. 从图 3 可以看出, 当  $\gamma = 16$  时, 电子定域长度远远大于 poly(dG)-poly(dC) 分子链的长度(10 个碱基对), 电子态是扩展的, 说明界面耦合得相当好, 是理想的耦合情况. 随着  $\gamma$  的增大(或减小),  $t_{couple} < t_{DNA}$  (或  $t_{couple} > t_{DNA}$ ), 界面耦合会变得越来越不理想. 从图 2 可以看出, 当  $\gamma = 50$  时, poly(dG)-poly(dC) 分子在许多能量上的透射率大大减小.  $\gamma = 50$  时, 电子定域长度较之  $t_{couple} = t_{DNA}$  时也明显减小了, 如图 3 所示.

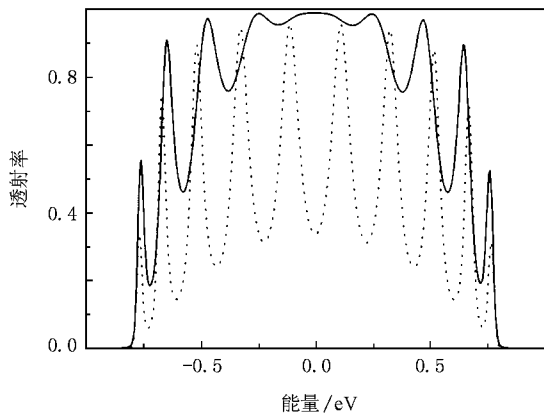


图 2 poly(dG)-poly(dC) 的透射谱 实线表示  $\gamma = 16$ , 虚线表示  $\gamma = 50$

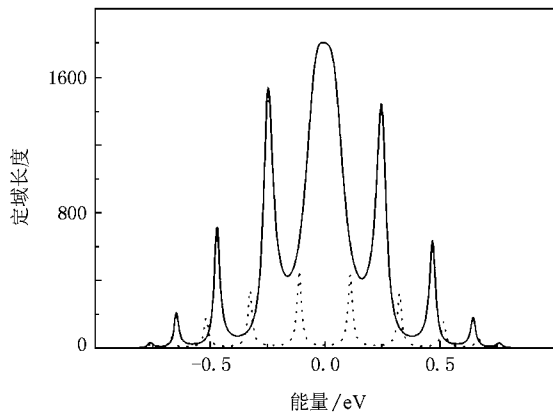


图 3 poly(dG)-poly(dC) 电子态的定域长度 实线表示  $\gamma = 16$ , 虚线表示  $\gamma = 50$

图 4 给出了随着界面耦合系数  $\gamma$  的增大, poly(dG)-poly(dC) 分子的平均透射率的变化. 从图 4 可以看出, 当  $\gamma = 16$  时,  $t_{couple} = t_{DNA}$ , 平均透射率最大. 此时 poly(dG)-poly(dC) 分子与金属电极耦合最理想. 随着对理想耦合系数  $\gamma = 16$  的偏离, 平均透射率不断减小. 由此可知, 金属电极与 poly(dG)-poly(dC) 分子界面耦合的强弱对分子的导电性有较

大的影响. 这是因为随着对理想耦合系数的偏离, 金属电极和 poly(dG)-poly(dC) 分子之间的耦合变得越来越弱, 界面处形成的势垒越来越大, 电子更加不易从金属电极转移到 poly(dG)-poly(dC) 分子中, 以致透射率和电子定域长度减小.

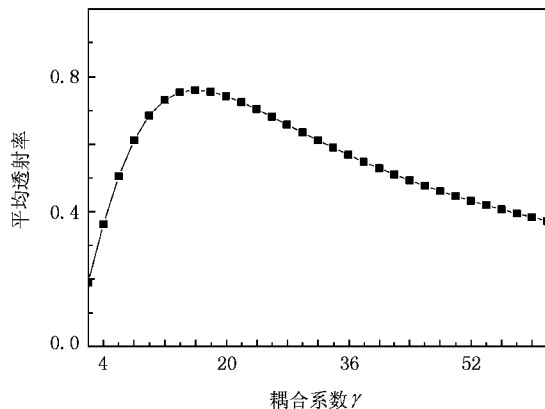


图 4 poly(dG)-poly(dC) 的平均透射率随界面耦合系数  $\gamma$  的变化

### 3.2. 金属电极与分子界面耦合对 poly(dA)-poly(dT) DNA 分子电荷输运性质的影响

同样, 我们取界面耦合处的电子跃迁积分  $t_{couple} = (t_m + t_{DNA})\gamma$ . 当  $\gamma = 31$  时,  $t_{couple} = t_{DNA}$ , 此时界面耦合得相当好, 是理想的耦合情况. 当  $\gamma = 4$  时,  $t_{couple} \neq t_{DNA}$ , 界面耦合变弱, poly(dA)-poly(dT) 分子在许多能量上的透射率大大减小, 电子定域长度与  $t_{couple} = t_{DNA}$  时相比明显减小, 很多能量上的电子定域长度小于分子链的长度, 电子态变得局域起来, 如图 5 和图 6 所示.

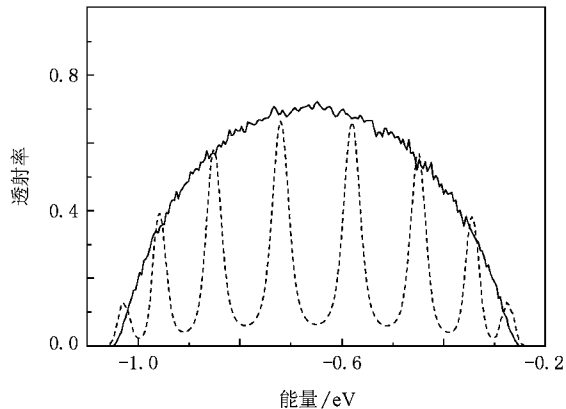


图 5 poly(dA)-poly(dT) 的透射谱 实线表示  $\gamma = 31$ , 虚线表示  $\gamma = 4$

图 7 给出了随着界面耦合系数  $\gamma$  的增大,

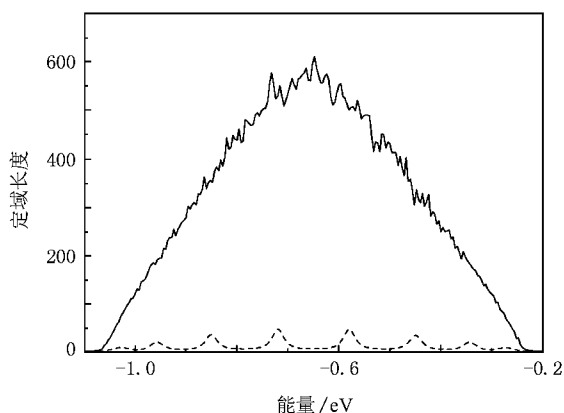


图6 poly(dA)-poly(dT)电子态的定域长度 实线表示  $\gamma = 31$ , 虚线表示  $\gamma = 4$

poly(dA)-poly(dT)分子的平均透射率的变化.从图7可以看出,当  $\gamma = 31$  时,  $t_{\text{couple}} = t_{\text{DNA}}$ , 平均透射率最大.此时 poly(dA)-poly(dT)分子与金属电极耦合最理想.随着对理想耦合系数  $\gamma = 31$  的偏离,  $t_{\text{couple}}$  与  $t_{\text{DNA}}$  相差增大, 平均透射率不断减小.由此可见, 金属电极与 poly(dA)-poly(dT)分子界面耦合的强弱同样对该分子的导电性有较大的影响.

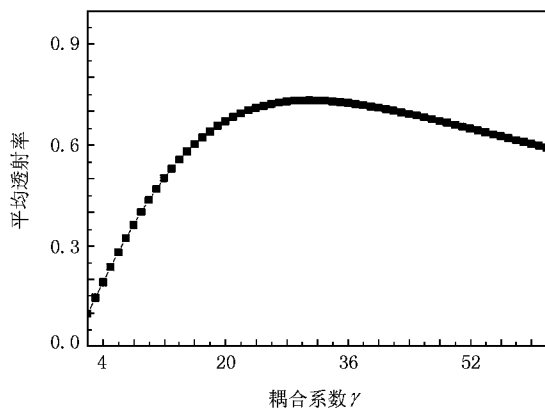


图7 poly(dA)-poly(dT)的平均透射率随界面耦合系数  $\gamma$  的变化

总之, 针对 poly(dG)-poly(dC)和 poly(dA)-poly(dT)分子导电性的研究发现, 金属电极与 DNA 分子之间的界面耦合情况对透射率和电子定域长度有显著的影响. 所以, 实验上界面耦合的情况将会大大影响人们对分子导电性的测量.

### 3.3. poly(dA)-poly(dT)和 poly(dG)-poly(dC) DNA 分子的伏安特性

当两种分子与界面耦合理想时, 从图2和图5

可以看出, poly(dG)-poly(dC)分子的透射率远大于 poly(dA)-poly(dT)分子的透射率; 从图3、图6可以看出, poly(dG)-poly(dC)分子的电子定域长度远大于 poly(dA)-poly(dT)分子的电子定域长度. 这说明前者电子波函数的扩展性强于后者. 从图8两种分子的伏安特性上看, poly(dG)-poly(dC)的开启电压小于 poly(dA)-poly(dT)的开启电压, 并且当分子两端电极所加电压均大于开启电压时, poly(dG)-poly(dC)分子中的电流大于 poly(dA)-poly(dT)分子中的电流. 所以, poly(dG)-poly(dC)的导电性优于 poly(dA)-poly(dT)的导电性. 这与实验结果相一致<sup>[17-22]</sup>, Hennig 等<sup>[12]</sup>也得出了同样的结论.

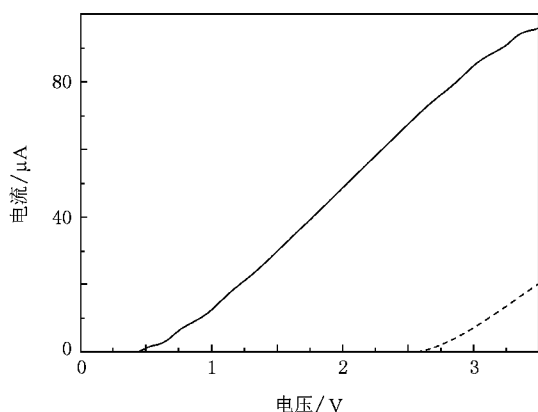


图8 DNA分子的伏安特性曲线 实线表示 poly(dG)-poly(dC), 虚线表示 poly(dA)-poly(dT)

poly(dG)-poly(dC)的导电性之所以优于 poly(dA)-poly(dT)的导电性, 原因是沿螺旋轴方向 DNA 分子相邻碱基对通过  $\pi$  电子相互作用形成有利于载流子传导的通道, 若碱基对之间电子跃迁积分越大, 则意味着此通道能更好地传导载流子. 由于碱基对 G/C 具有较大的跃迁积分, 所以在 poly(dG)-poly(dC)分子中将能提供更好的载流子传导通道.

## 4. 结 论

通过以上对 poly(dG)-poly(dC)和 poly(dA)-poly(dT)分子导电性的研究, 我们发现界面耦合对 DNA 分子电荷输运具有较大的影响. 当耦合系数  $\gamma$  等于理想耦合系数时,  $t_{\text{couple}} = t_{\text{DNA}}$ , DNA 分子与金属电极的耦合最好, 此时测得的 DNA 分子的透射率最大. 当耦合系数  $\gamma$  偏离理想耦合系数时, 偏离越大,  $t_{\text{couple}}$  与  $t_{\text{DNA}}$  相差越大, DNA 分子与金属电极的耦合就变得越不理想, 此时测得的 DNA 分子在许多能量

上的透射率大大减小,电子定域长度也大大减小,从而影响了人们对 DNA 分子导电性的测量.

实验上,人们对 DNA 分子的电荷运输性质已经

进行了深入的研究,发现 poly(dG)-poly(dC)的导电性优于 poly(dA)-poly(dT)的导电性.在本文中我们证实了这一结论.

- 
- [ 1 ] Murphy C J , Arkin M R , Jenkins Y , Ghatlia N D , Bossmann S H , Turro N J , Barton J K 1993 *Science* **262** 1015
- [ 2 ] Arkin M R , Stemp E D A , Holmin R E , Barton J K , Hörmann A , Olson E J C , Barbara P F 1996 *Science* **273** 475
- [ 3 ] Watson J D , Crick F H C 1953 *Nature* **171** 737
- [ 4 ] Eley D D , Spivery D I 1962 *Trans. Faraday Soc.* **58** 411
- [ 5 ] Fink H W , Schönenberger C 1999 *Nature* **398** 407
- [ 6 ] Porath D , Ghosh A W , Datta S 2000 *Nature* **403** 635
- [ 7 ] Zhang Y , Austin R H , Kraeft J , Cox E C , Ong N P 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 198102
- [ 8 ] Kasumov A Y , Kociak M , Guéron S , Reulet B , Volkov V T , Klinov D V , Bouchiat H 2001 *Science* **291** 280
- [ 9 ] Grozema F C , Siebbeles L D A , Berlin Y A , Ratner M A 2002 *Chemphys. Chem.* **6** 536
- [ 10 ] Bruinsma R , Grüner G , Orsogna M R D , Rudnick J 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 4393
- [ 11 ] Hennig D , Archilla J F R , Agarwal J 2003 *Physica D* **180** 256
- [ 12 ] Hennig D , Starikov E B , Archilla J F R , Paimero F 2004 *J. Biol. Phys.* **30** 227
- [ 13 ] Yamada H , Starikov E B , Hennig D , Archilla J F R 2005 *Eur. Phys. J. E* **17** 149
- [ 14 ] Yu Z G , Song X Y 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 6018
- [ 15 ] Hübsch A , Endres R G , Cox D L , Singh R P 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 178102
- [ 16 ] Stephan R 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 108103
- [ 17 ] Yoo K H , Ha D H , Lee J O , Park J W , Kim J , Kim J J , Lee H Y , Kawai T , Choi H Y 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 198102
- [ 18 ] Pichard J L 1986 *J. Phys. C : Solid State Phys.* **19** 1519
- [ 19 ] Datta S 1995 *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* ( Cambridge : Cambridge University Press )
- [ 20 ] Conwell E M , Rakhmanova S V 2000 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **97** 4556
- [ 21 ] Li X Q , Yan Y J 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 2190
- [ 22 ] Cai L T , Tabata H , Kawai T 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 3105

# Effects of interfacial couplings on charge transport properties of DNA molecule<sup>\*</sup>

Meng Xian-Lan<sup>1)</sup> Gao Xu-Tuan<sup>3)</sup> Qu Zhen<sup>1)</sup> Kang Da-Wei<sup>1)</sup>

Liu De-Sheng<sup>1)†</sup> Xie Shi-Jie<sup>1)</sup>

1) *State Key Laboratory of Crystal Materials, School of Physics, Shandong University, Jinan 250100, China*

2) *Department of Physics, Jining University, Qufu 273155, China*

3) *School of Physics, Shandong University of Technology, Zibo 255049, China*

( Received 11 December 2007 ; revised manuscript received 18 April 2008 )

## Abstract

Using the three-dimensional tight-binding model and the matrix transfer method, effects of interfacial couplings on the charge transport properties of DNA molecule have been studied. The results indicate that when the interfacial couplings are ideal, both transmission coefficient and localization length of electrons are larger, the molecule shows higher conductivity, while the case is the contrary when the interfacial couplings are unideal. When the molecule and the metallic electrodes couple ideally, through voltage-current characteristic, it is found that the onset voltage of poly(dG)-poly(dC) DNA is lower than that for the poly(dA)-poly(dT) counterpart, and the current of the former is larger than that of the latter under the same bias voltage, so the conductivity of poly(dG)-poly(dC) DNA is higher than that of the poly(dA)-poly(dT) counterpart.

**Keywords** : interfacial couplings, transmission coefficient, localization length, conductivity

**PACC** : 8715, 7210, 7340

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10574082 ) and the Natural Science Foundation of Shandong Province, China ( Grant No. Z2005A01 ).

<sup>†</sup> E-mail : liuds@sdu.edu.cn