

Cantor 型人工 DNA 序列的关联属性及输运性质*

刘小良[†] 梁亮文 徐 慧 李 江

(中南大学物理科学与技术学院超微结构和超快过程研究所,长沙 410083)

(2010 年 7 月 26 日收到;2010 年 9 月 27 日收到修改稿)

对接膨胀规律 $A \rightarrow ABA$ 和 $B \rightarrow BBB$ 生成的有限长度 Cantor 型人工 DNA 序列,采用统计方法研究了序列的净位移及其标准偏差、重标极差函数及其 Hurst 指数,并将结果与一维随机二元序列进行了对比,直接论证了 Cantor 序列具有关联、标度不变及自相似等性质.从 Anderson 紧束缚模型出发,采用重整化群方法研究了该序列的电子输运特性.研究表明具有好的输运效率的扩展态能在较宽的能量区间上存在,随着序列长度的增加,扩展态的能量区间变得更为细碎,但具有好的透射性的电子态数量只是略有减少,共振能态可以在较长的序列中存在,推测为 Cantor 序列中存在有较强关联的结果.不同长度 Cantor 序列的 Lyapunov 指数的相似性进一步证明了 Cantor 序列中存在有自相似性及标度不变性.

关键词: Cantor 型人工 DNA 序列, 关联属性, 电荷输运效率, Lyapunov 指数

PACS: 72.10.-d, 02.60.-x

1. 引言

自 1962 年 Eley 等人^[1]提出 DNA 可能具有导电性以来,DNA 的内在载流子传递特性已经引起了人们的广泛关注,由于其独特的电荷输运性能,DNA 被认为是突破半导体材料微小化极限的理想候选者,有望在 DNA 芯片^[2]、DNA 分子器件^[3]、DNA 传感器^[4]和 DNA 计算机^[5]等材料与信息科学领域内展示其广阔的应用前景.

迄今为止已经有过许多 DNA 电学特性的研究工作^[6-13],取得过一些共识,但也存在大量相互矛盾的地方.在实验上,Barton 等人^[14]用荧光猝灭法得出电子在 DNA 中高速传递而使其成为分子导体;还有人^[15]直接采用伏安法测量了 DNA 分子链的电阻,但得到的结果差别很大,发现 DNA 分子可能呈现绝缘体^[16,17]、半导体^[18]或导体^[19]行为,甚至还可能是超导体^[20],而且实验的重复性也不太好.这一切或许可归于这些实验在技术上的复杂性,因为涉及到单分子和 DNA 小团簇的操纵,温度和溶液环境

也难以适当处理,甚至 DNA 与金属导线和支撑物表面的接触都可能扮演一个不可忽略的作用.理论上关于 DNA 分子导电性的争论也很多,Anantram 等人^[21]认为,DNA 分子中电荷的输运虽具有共振隧穿行为,但受钠离子等环境的重要影响,Yoo 等^[22]则认为是由极化子传输造成的,Ye 等人^[23]则倾向于认可电荷的近邻输运机理,而 Berlin 等人^[24]则把 DNA 分子中有关电荷转移和输运看作是一个多步跃迁的过程.

最近,一些学者提出,DNA 的导电性与其序列的内在关联属性有着密切联系. Carpena^[25]从理论上研究了一维无序二元固体中引入长程关联可在系统中获得扩展态,甚至会产生从绝缘相到金属相的转变. Albuquerque 等人^[26]考虑了 DNA 分子链中长程关联对电子局域化特性及电子输运的影响,对关联强度与导电性能的影响进行了定量的理论研究. de Moura 等人^[27]研究了在位能量具有长程关联无序的一维紧束缚模型中电子的性质,发现格点能量分布谱密度的幂律指数存在一个金属—绝缘体转变的临界值.

* 中国博士后科学基金(批准号:20080431025),湖南省自然科学基金(批准号:08JJ3005)和中南大学博士后科学基金(批准号:20071025)资助的课题.

[†] E-mail: xlliucu@sina.com

人们最初关心的是自然 DNA 序列的导电性,随着 DNA 人工合成技术的发展,对人工构建的 DNA 序列的导电性研究也已引起人们的重视. 由于人工构建的 DNA 序列的各项参数,如各碱基对的成分、序列的关联度等可以人为控制,这对基于 DNA 的分子器件的实现是非常重要的. 三分 Cantor 序列^[28]是最简单的确定性分形几何,它反映的是一种介于周期和无序之间的准周期结构,其结构特点为人们了解周期结构和随机结构中间区域的了解提供了便利.

本文针对三分 Cantor 型人工 DNA 序列,先用统计方法对其关联属性进行数值计算,借助一维随机行走模型^[29,30]研究了行走者位移的标准偏差、序列的重标极差函数以及 Hurst 指数等,根据这些统计量直接证明系统的关联性、自相似性以及标度不变性等特征. 再利用重整化群方法^[31,32]对其输运性质进行了研究,数值模拟了序列的局域长度、输运系数和 Lyapunov 指数,以揭示序列的关联属性对其输运性质的影响.

2. Cantor 型 DNA 序列模型

将腺嘌呤 (Adenine) 和胸腺嘧啶 (Thymine) 的配对称 A 型碱基对格点,将鸟嘌呤 (Guanine) 和胞嘧啶 (Cytosine) 的配对称 B 型碱基对格点,按膨胀规律 $A \rightarrow ABA$, $B \rightarrow BBB$ 简单重复即可获得 Cantor 型^[28]人工 DNA 序列. 它的第 m 代可用递推关系表示为 $S_m = S_{m-1} B_m S_{m-1}$, 初始条件为 $S_0 = A$ 和 $S_1 = ABA$. 于是 Cantor 型人工 DNA 序列即为, $S_1 = ABA$, $S_2 = ABABBBABA$, $S_3 = ABABBBABABBBBBBBBABABBBABA \dots$, 如图 1 所示. 在这种情况下,第 m 代的 B_m 仅在厚度上与第 1 代的 B_1 不同,且 $dB_m = 3^{m-1} dB_1$. 由该序列的构建规则可知,第 m 代序列的长度 $N = 3^m$.

只考虑最近邻格点的相互作用, Cantor 型 DNA 序列的一维单电子紧束缚哈密顿量^[33,34]可表示为

$$H = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i=1}^N t (|i\rangle \langle i+1| + |i\rangle \langle i-1|), \quad (1)$$

其中 $\{|i\rangle\}$ 为 Wannier 表象中的基函数,在位格点能量 ε_i 可取两个值 ε_A 和 ε_B , 分别对应于 A 型和 B 型碱基对格点. t 是跳跃积分,为使问题简化,我们已经将最近邻碱基对格点之间的跳跃积分取为相

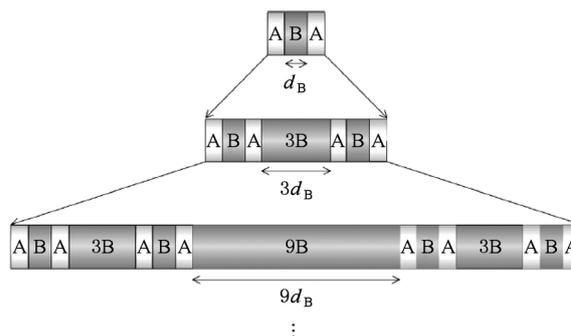


图 1 Cantor 型 DNA 序列的结构示意图

同,而不考虑相邻碱基对的类型. 根据有关文献^[35]的结论,四种碱基的离子势分别为 $\varepsilon_{Ad} = 8.24 \text{ eV}$, $\varepsilon_{Th} = 9.14 \text{ eV}$, $\varepsilon_{Gu} = 7.75 \text{ eV}$ 和 $\varepsilon_{Cy} = 8.87 \text{ eV}$, 可以取腺嘌呤和胸腺嘧啶离子势的平均值 8.69 eV 作为 A 型碱基对格点的在位势,取鸟嘌呤和胞嘧啶离子势的平均值 8.31 eV 作为 B 型碱基对格点在位势,但我们在后面的计算中,为了简化对整个能量做了一个平移,取 A, B 型碱基对在位势的中间点为能量零点,这样, $\varepsilon_A = 0.19 \text{ eV}$, $\varepsilon_B = -0.19 \text{ eV}$, 另外,取跳跃积分 $t = 1 \text{ eV}$.

3. Cantor 型 DNA 序列的关联属性

3.1. 净位移及其标准偏差

为讨论 Cantor 型 DNA 序列的关联属性,先采用统计方法中的一维随机行走模型来计算序列的净位移^[29]. 我们按如下规则来定义行走,经过 A 型碱基对格点 i 称为下行,取 $\xi_i = -1$, 经过 B 型碱基对格点称为上行,取 $\xi_i = +1$. 则经历 n 步行走以后,总的净位移就是

$$\xi(n) = \sum_{i=1}^n \xi_i. \quad (2)$$

图 2 中给出了第 3 和第 5 代 Cantor 型 DNA 序列的净位移 $\xi(n)$ 随行走步数的变化关系. 通过净位移的大小可以看出序列中 A, B 型碱基对的相对数量及其在序列中的分布情况,对 Cantor 型 DNA 序列,由其构建方式可知当 $m \geq 2$ 时,它的 B 型碱基对数量大于 A 型碱基对数量,且在序列的中间三分之一部分全部为 B 型碱基对,这在图中分别表现为序列的总净位移为正并且其曲线的中间三分之一部分净位移保持线性增长.

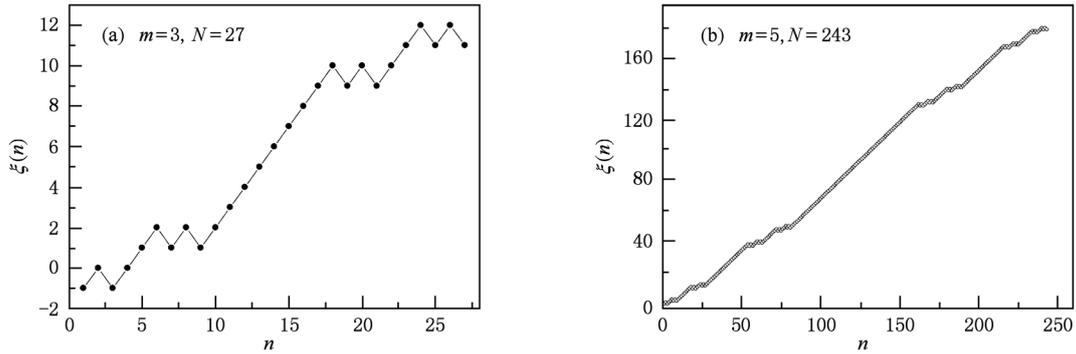


图2 净位移 $\xi(n)$ 随行走步数 n 的变化关系 (a) $m=3, N=27$; (b) $m=5, N=243$

为确定各行走步数净位移取值的离散程度, 可研究净位移的标准偏差

$$\sigma(n) = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n [\xi_i - \bar{\xi}_n]^2}, \quad (3)$$

其中 $\bar{\xi}_n$ 为 n 步行走后的平均净位移, 即

$$\bar{\xi}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i.$$

图3中给出了净位移的标准偏差 $\sigma(n)$ 的函数曲线, 其中图3(a), (b) 分别为第7代和第8代Cantor型DNA序列的 $\sigma(n)$, 为供比较, 图3(c)中给出了随机二元序列的 $\sigma(n)$. 由图3(c)可以看出, 对于随机二元序列, 其标准偏差在开始时存在

无规振荡, 但随着 n 的增加, 振荡幅度减弱, 并以 1.0000 为渐近线. 我们这里所选择的随机序列中两种格点的比例为 1:1, 在一段比较长的序列中, 其平均净位移 $\bar{\xi}$ 趋向于零, 由(3)式可知, $\sigma(n)$ 自然趋向于 1. 对于图3(a)和(b)所描述的Cantor序列, 其标准偏差伴随着一些比较规则的振荡整体呈减小趋势, 可以看出第8代的前三分之一曲线实质上就是第7代曲线的重复. 随着代数 m 的增加, Cantor型序列的标准偏差会向零无限趋近, 由这种序列的生成方法可知, 其A, B型格点比例为 $2^m / (3^m - 2^m)$, 其中 $m \geq 1$, 当 $m \rightarrow \infty$ 时, A型格点所占比例趋向于零.

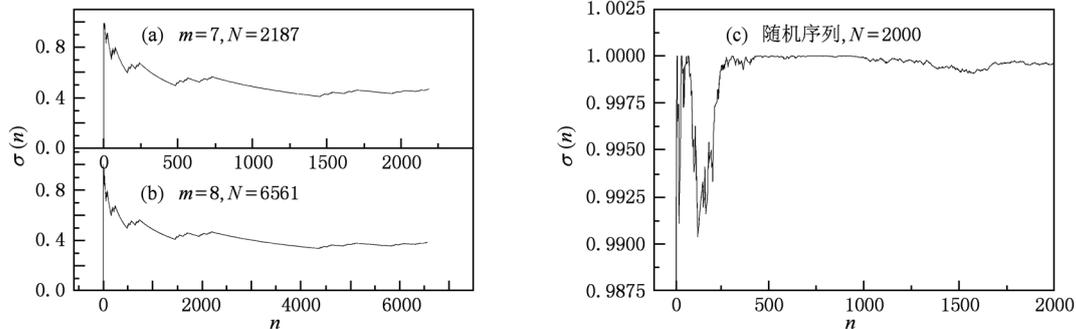


图3 净位移标准偏差 $\sigma(n)$ 随行走步数 n 的变化关系 (a) 第7代Cantor型DNA序列; (b) 第8代Cantor型DNA序列; (c) 随机二元序列

另外, 对比图2(a)和(b), 图3(a)和(b)可以发现, 当对Cantor型序列采用新的标度时, $\xi(n)$ 和 $\sigma(n)$ 曲线的形状几乎完美的一致, 说明这种准周期序列具有良好的标度不变性和自相似性.

3.2. 重标极差函数及 Hurst 指数

由 Hurst^[36] 提出的重标极差函数分析是描述一维序列统计属性的一个重要方法, 能有效地揭示准

周期序列的长程关联性^[34,37].

首先定义一个系统的再标度变量来描述行走量为 n 时的累计离差

$$X(k, n) = \sum_{i=1}^k [\xi_i - \bar{\xi}_n], \quad (4)$$

其中 $1 \leq k \leq n$, 行走量为 n 时再标度变量的范围为

$$S(n) = \max[X(k, n)] - \min[X(k, n)], \quad (5)$$

据此可得到重标极差函数 $R(n)$ 为

$$R(n) = S(n)/\sigma(n). \quad (6)$$

根据 Hurst 分析法,将 $R(n)$ 与 n 的关系拟合为 $R(n) \propto n^H$ 的幂律形式,其中指数 H 称为 Hurst 指数^[36],可以通过下式获得:

$$H(n) = \{ \ln[R(n)] - \ln[R(n-h)] \} / [\ln(n) - \ln(n-h)], \quad (7)$$

其中 h 为所选步长.

图 4 给出了两不同长度的 Cantor 型 DNA 序列的重标极差函数 $R(n)$,而图 5 给出了相应的 Hurst 指数 $H(n)$,为方便对比,图中还给出了随机二元 DNA 序列的 $R(n)$ 和 $H(n)$. 对于有限变量的无限随

机过程,人们已经知道,其重标极差函数具有 $R(n) = \sqrt{\frac{\pi n}{2}} - 1$ 形式,对应的函数曲线为一抛物线,如图 4 中的虚线所示. 自然,这种非关联随机序列的 Hurst 指数 $H = 0.5$,如图 5 中的空心圆点线所示. Cantor 型 DNA 序列的重标极差函数 $R(n)$ 呈现出一定的振荡特性,且小于同样长度随机序列的 $R(n)$,预示着 Cantor 型 DNA 序列的 Hurst 指数要小于 0.5,从图 5 中的实心圆点线可以看出,对于我们所研究的系统尺寸范围内,其 Hurst 指数大约为 0.23,表明系统具有一定的关联性(负相关).

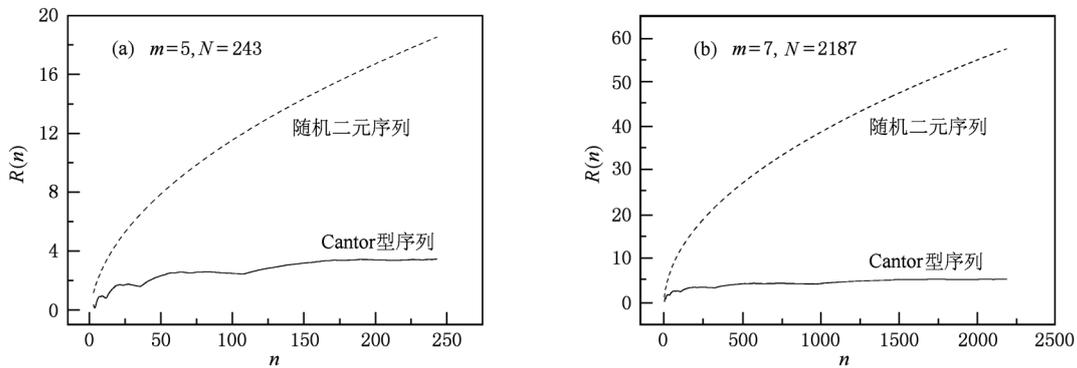


图 4 Cantor 型 DNA 序列的重标极差函数 (a) $m=5, N=243$; (b) $m=7, N=2187$

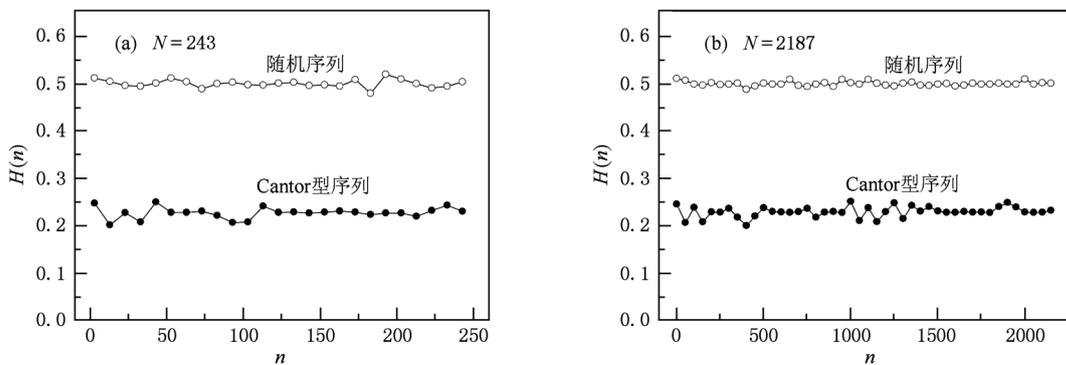


图 5 Cantor 型 DNA 序列的 Hurst 指数 (a) $m=5, N=243$; (b) $m=7, N=2187$

4. Cantor 型 DNA 序列的电荷输运性质

4.1. 局域长度

电子态的局域长度是反映系统电荷输运能力的一个重要参量,重整化群^[31,32]方法可用来有效计算 Cantor 型 DNA 序列的局域长度. 通过将哈密顿量 (1) 的矩阵元对所保留的格点进行重整化,消去所

选定的格点时,公式保留部分形式不变,只是格点的能量和跳跃积分被重整化了. 我们只保留第一个和最后一个格点而将系统的其余格点消去.

重整化后保留格点的在位能量和跳跃积分可以表示成以下迭代形式:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^{N-2}(E) &= \varepsilon_1^{N-3}(E) + t_{1,N-1}^{(\text{eff})}(E) \\ &\times \frac{1}{E - \varepsilon_{N-1}^{(N-3)}(E)} t_{N-1,1}^{(\text{eff})}, \end{aligned}$$

$$\varepsilon_N^{N-2}(E) = \varepsilon_N + t \frac{1}{E - \varepsilon_{N-1}^{(N-3)}(E)} t,$$

$$t_{1,N}^{(\text{eff})}(E) = t_{1,N-1}^{(\text{eff})}(E) \frac{1}{E - \varepsilon_{N-1}^{(N-3)}(E)} t, \quad (8)$$

其中 E 是 Cantor 型 DNA 序列的本征能量, $\varepsilon_1^{(N-2)}(E)$ 和 $\varepsilon_N^{(N-2)}(E)$ 分别是在消去中间 $(N-2)$ 个格点

后第 1 和第 N 格点的有效在位能量, $t_{1,N}^{(\text{eff})}(E)$ 代表它们之间的有效相互作用。

由重整化后的有效相互作用, 可将序列中电子态的局域长度 $L(E)$ 表示为

$$\frac{1}{L(E)} = - \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{N} t_{1,N}^{(\text{eff})} \right]. \quad (9)$$

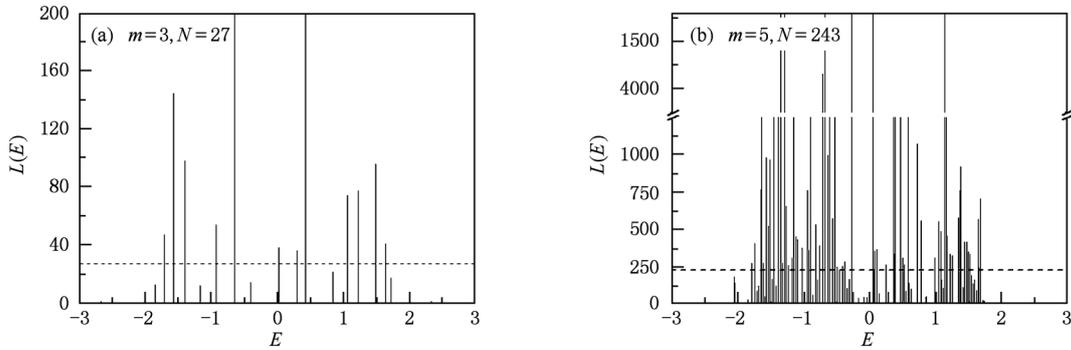


图 6 Cantor 型 DNA 序列中电子态的局域长度 (a) $m=3, N=27$; (b) $m=5, N=243$

图 6 给出了 $m=3, 5$ 的 Cantor 型 DNA 序列中电子态的局域长度随本征能量的变化关系, 其中虚线标记了序列长度位置, 为显示细节, 我们对较大的局域长度做了截断. 从图中可以看到, Cantor 型 DNA 序列中, 有相当数量本征能量值下, 电子态的局域长度大于序列的长度, 即处在这些状态下的电子可以在整个序列中出现, 这就是扩展态. 同时可以看出, 在其他本征能量值下的电子态的局域长度小于序列的长度, 对应着局域态. 计算表明 Cantor 型 DNA 序列中扩展态、局域态可以共存, 而且对于不同特征的 Cantor 链, 在其中具有很好透射性的电子态具有不同的本征能量值, 因此可以用作电子选择过滤器.

4.2. 输运系数

将重整化群理论和散射理论^[38]相结合, 可计算 Cantor 型 DNA 序列的电子输运系数. 把重整化后的 Cantor 序列接入一个由 A 型格点构成的一维无限长晶格中, 为方便写出系统的哈密顿量, 我们对系统的各格点进行了编号, 如图 7 所示, 重整化后 Cantor

型 DNA 序列的两个格点在新系统中被标记为格点 0 和 1, 左右两半无限长晶格线可以看作电子的输入和输出库.

假定晶格线可以描绘成一维紧束缚模型, 格点能量为 ε_A , 跳跃积分同样取为 t , Cantor 序列与左右两半无限长的晶格线之间的耦合系数为 t_1 和 t_2 .

此时整个系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_{i \neq 0,1} \varepsilon_A |i\rangle \langle i| + \sum_{i \neq -1,0,1,2} t (|i\rangle \langle i+1| + \text{H. c.}) + \varepsilon_1^{(N-2)} |0\rangle \langle 0| + \varepsilon_N^{(N-2)} |1\rangle \langle 1| + t_1 (|-1\rangle \langle 0| + \text{H. c.}) + t_{1,N}^{(\text{eff})} (|0\rangle \langle 1| + \text{H. c.}) + t_2 (|1\rangle \langle 2| + \text{H. c.}), \quad (10)$$

其中 $|0\rangle$ 表示格点“0”的轨道波函数. Cantor 序列中第一个和最后一个原子的有效势 $\varepsilon_1^{(N-2)}$ 和 $\varepsilon_N^{(N-2)}$ 分别表示图 7 中格点 0 和 1 的在位能量.

将系统的本征波函数 $|\varphi\rangle$ 用 Wannier 函数基展开 $|\varphi\rangle = \sum_i p_i |i\rangle$, 代入哈密顿量 (10) 对应的

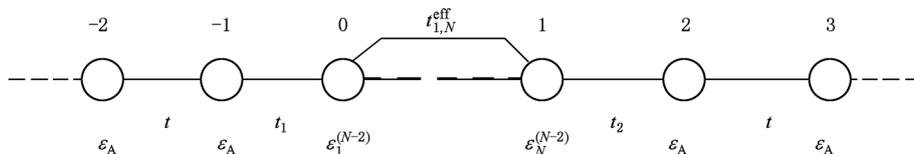


图 7 重整化后 Cantor 序列接入无限长晶格示意图

Schrödinger 方程 $\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$, 可以得到关于展开系数 p_i 的薛定谔方程

$$\varepsilon_1^{(N-2)} p_0 + t_{1N}^{(\text{eff})} p_1 + t_1 p_{-1} = E p_0, \quad (11)$$

$$\varepsilon_N^{(N-2)} p_1 + t_{1N}^{(\text{eff})} p_0 + t_2 p_2 = E p_1, \quad (12)$$

$$\varepsilon_A p_{-1} + t p_{-2} + t_1 p_0 = E p_{-1}, \quad (13)$$

$$\varepsilon_A p_2 + t p_3 + t_2 p_1 = E p_2, \quad (14)$$

$$\varepsilon_A p_i + t p_{i+1} + t p_{i-1} = E p_i \quad (i \neq -1, 0, 1, 2). \quad (15)$$

假设具有单位振幅的波函数从左侧晶格线入射, 系数 p_i 可写为

$$p_i = \begin{cases} e^{ik(i+1)} + r e^{-ik(i+1)}, & i \leq -1, \\ t e^{ik(i-2)}, & i \geq 2, \end{cases} \quad (16)$$

其中的参数 t 和 r 分别是透射和反射系数, k 是晶格线波矢, 它满足晶格能带公式

$$E = \varepsilon_A + 2t \cos k. \quad (17)$$

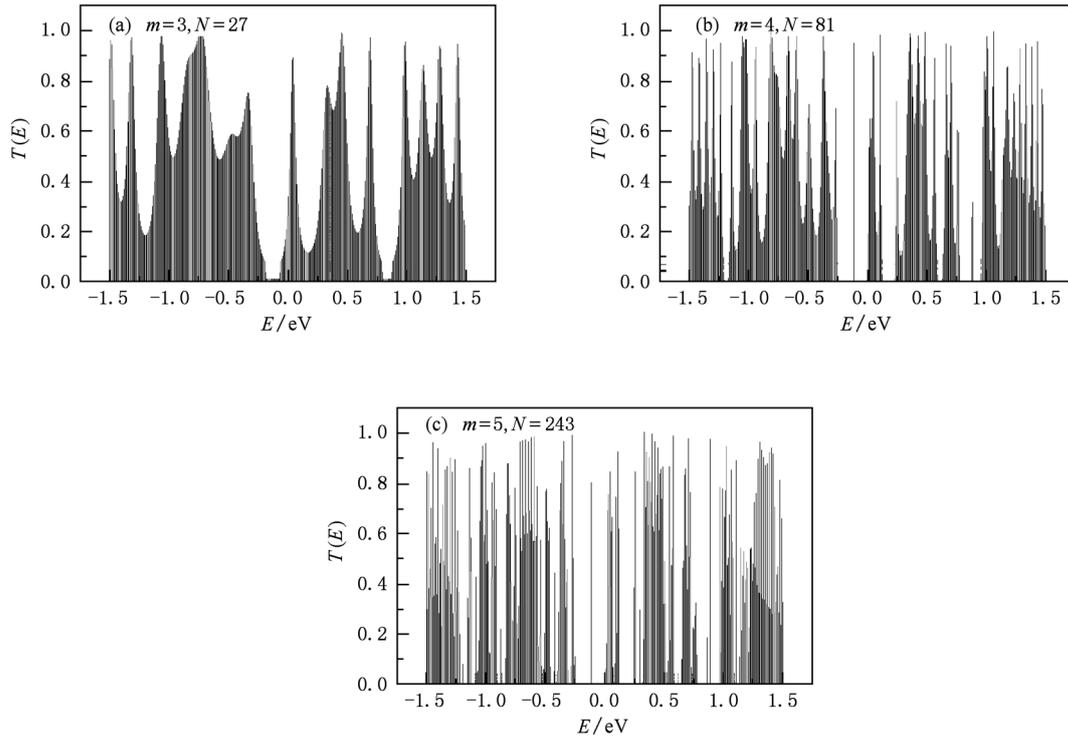


图8 Cantor 型 DNA 序列的输运系数 (a) $m=3, N=27$; (b) $m=4, N=81$; (c) $m=5, N=243$

由以上的薛定谔方程可以得出, 系统的输运系数为

$$T(E) = |t(E)|^2 = \frac{4B^2 \sin^2 k \{ [C + (A + D) \cos k]^2 + (A - D)^2 \sin^2 k \}}{[(A + C \cos k + D \cos(2k))^2 + \sin^2 k (C + 2D \cos k)^2]^2}, \quad (18)$$

其中

$$A = (E - \varepsilon_A) t \{ [E - \varepsilon_1^{(N-2)}] [E - \varepsilon_N^{(N-2)}] - [t_{1N}^{(\text{eff})}]^2 \} - [E - \varepsilon_N^{(N-2)}] t^2, \quad B = t t_1 t_2 t_{1N}^{(\text{eff})},$$

$$C = t_1^2 t_2^2 + [t t_{1N}^{(\text{eff})}]^2 - [E - \varepsilon_1^{(N-2)}] \{ t_2^2 (E - \varepsilon_A) - [E - \varepsilon_N^{(N-2)}] t^2 \}, \quad D = [E - \varepsilon_1^{(N-2)}] t t_2^2.$$

图8给出了 m 分别为 3, 4, 5 时 Cantor 型 DNA 序列的输运系数按本征能量的分布, 计算中我们已经将耦合系数设置为 $t_1 = t_2 = t = 1$ eV. 从图8可以看出, 系统在相当数量本征能量值下具有较大的输运系数, 出现了输运系数等于或近似等于 1 的共振峰, 印证了 4.1 节关于 Cantor 序列中存在相当数量扩展态的结论. 当序列长度增加时, 输运系数谱逐渐细化, 某些在短序列中呈现连续谱的区间, 逐步

变成了分立谱, 具有好的透射性的能态总体上减少; 具有高输运系数的共振峰位置大体保持不变, 相应地, 具有低输运系数的能量区间——禁带位置也基本保持固定, 但也有一些新共振峰出现, 说明少数能态比在较短序列中透射性更好.

4.3. Lyapunov 指数

根据序列的输运系数, 可以引入 Lyapunov

指数^[39]

$$\gamma(E) = (1/2N) |\ln[T(E)]|. \quad (19)$$

从其定义可以看出, $\gamma(E)$ 也可用来描述系统的输运

性能, $\gamma(E)$ 越大, 对应能态的透射性越差, $\gamma(E)$ 越小, 对应能态透射性越好, 但 Lyapunov 指数常被用来表征系统的标度性质.

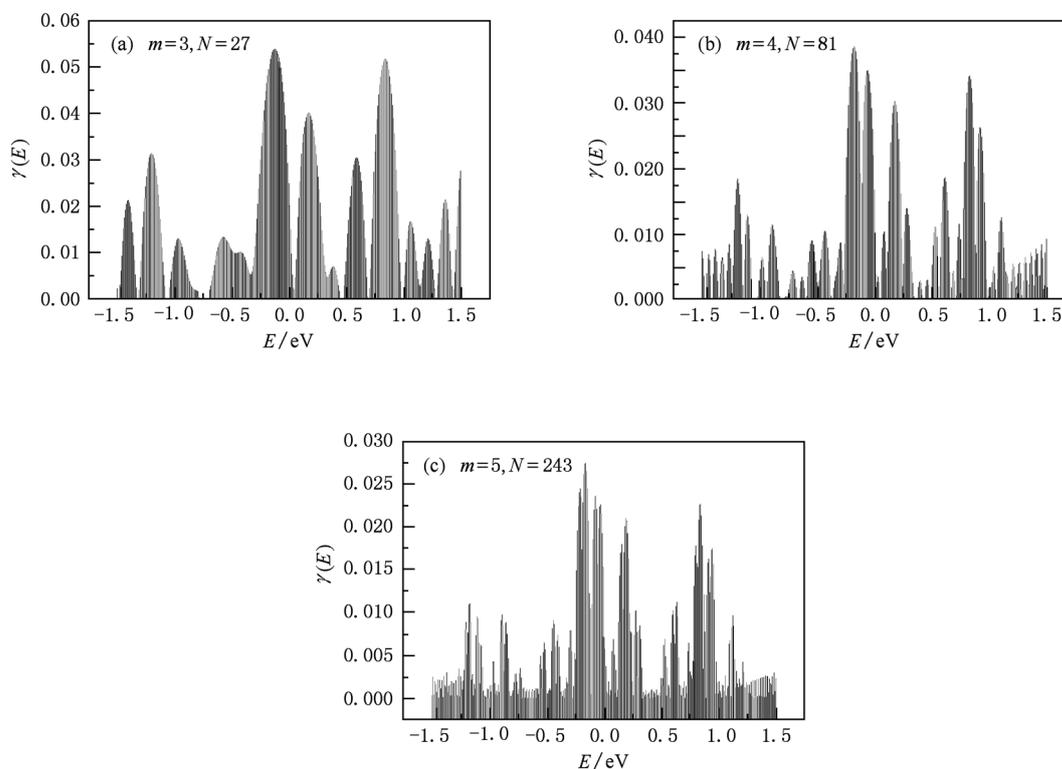


图9 Cantor型DNA序列的Lyapunov指数 (a) $m=3, N=27$; (b) $m=4, N=81$; (c) $m=5, N=243$

图9中分别给出了 $m=3, 4, 5$ 时 Cantor 型 DNA 序列的 Lyapunov 指数, 从中可以发现, 当序列的长度从格点数 27 增大到 81, 进而增大到 243 时, $\gamma(E)$ 曲线的形状具有一定的稳定性, 除了增加了一些精细结构之外, 曲线上各包块的位置及形状大体相同. 据此, 我们可以进一步推断 Cantor 型 DNA 序列具有标度不变性和自相似性.

5. 结 论

本文采用一维随机行走模型和 Hurst 分析法研究了有限长度 Cantor 型人工 DNA 序列的净位移及其标准偏差、重标极差函数及其 Hurst 指数. 从

Anderson 紧束缚模型出发, 采用重整化群方法研究了该序列的电子输运特性. 研究发现: 该序列的净位移及其标准偏差函数曲线对标度变化的稳定性直接证明了该序列的标度不变性及自相似性; Cantor 序列的 Hurst 指数约为 0.23, 小于 0.5, 说明该系统具有内在的关联属性; 该序列中存在相当数量具有好的透射性的扩展能态; 随着序列长度的增加, 扩展态的能量区间变得更为细碎, 共振峰的数量、高度及位置均有所改变, 具有好的透射性的电子态数量只是略有减少, 且能在相对较长的序列中维持其存在, 推测为 Cantor 序列中存在有较强关联的结果.

[1] Eley D D, Spivey D I 1962 *Trans. Faraday Soc.* **58** 411

[2] Schena M, Shalon D, Davis R W, Brown P O 1995 *Science* **270** 467

[3] Adleman L M 1994 *Science* **266** 1021

[4] Mao C D, Sun W Q, Shen Z Y, Seeman N C 1999 *Nature* **397** 144

- [5] Yurke B, Turberfield A J, Mills A P, Simmel F C, Neumann J L 2000 *Nature* **406** 605
- [6] Fink H W, Schonberger C 1999 *Nature* **398** 407
- [7] Zhang W, Ulloa S E 2006 *Phys. Rev. B* **74** 115304
- [8] Meng X L, Gao X T, Qu Z, Kang D W, Liu D S, Xie S J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5316 (in Chinese) [孟宪兰、高绪团、渠 朕、康大伟、刘德胜、解士杰 2008 物理学报 **57** 5316]
- [9] Liu X L, Xu H, Ma S S, Deng C S, Guo A M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5562 (in Chinese) [刘小良、徐 慧、马松山、邓超生、郭爱敏 2006 物理学报 **55** 5562]
- [10] Zhang W, Yang R, Ulloa S E 2009 *Phys. Rev. E* **80** 051901
- [11] Stephan R, Dominique B, Enrique M, Kats E 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 228101
- [12] Ma S S, Xu H, Wang H Y, Guo R 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3591
- [13] Gao J, Xu Z Y 2009 *Chin. Phys. B* **18** 0370
- [14] Hartshorn R M, Barton J K 1992 *J. Am. Chem. Soc.* **114** 5919
- [15] Porath D, Bezryadin A, de Vries S, Dekker C 2000 *Nature* **403** 635
- [16] Storm A J, van Noort J, de Vries S, Dekker C 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 3881
- [17] Zhang Y, Austin R H, Kraeft J, Cox E C, Ong N P 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 198102
- [18] Cuniberti G, Craco L, Porath D, Dekker C 2002 *Phys. Rev. B* **65** 241314
- [19] Hjort M, Stafstrom S 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 228101
- [20] Kasumov A Y, Kociak M, Guéron S, Reulet B, Volkov V T, Klinov D V, Bouchiat H 2001 *Science* **291** 280
- [21] Adessi Ch, Walch S, Anantram M P 2003 *Phys. Rev. B* **67** 081405
- [22] 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
- [23] Bruinsma R, Grüner G, D'Orsogna M R, Rudnick J 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 4393
- [24] Berlin Y A, Burin A L, Rather M A 2000 *J. Phys. Chem. A* **104** 443
- [25] Carpena P, B-Galván P, Ivanov P Ch, Stanley H E 2002 *Nature* **418** 955
- [26] Albuquerque E L, Vasconcelos M S, Lyra M L, de Moura F A B F 2005 *Phys. Rev. E* **71** 021910
- [27] de Moura F A B F, Lyra M L 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3735
- [28] Buttiker M, Imry Y, Landauer R, Pinhas S 1985 *Phys. Rev. B* **31** 6207
- [29] Peng C K, Buldyrev S V, Goldberger A L 1992 *Nature* **356** 168
- [30] Liu X L, Huang X M, Xu H, Ren Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4202 (in Chinese) [刘小良、黄晓梅、徐 慧、任 意 2010 物理学报 **59** 4202]
- [31] Farchioni R, Grosso G 1992 *Phys. Rev. B* **45** 6383
- [32] Liu X L, Xu H, Deng C S, Ma S S 2007 *Physica B* **392** 107
- [33] Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492
- [34] Liu X L, Ren Y, Xie Q T, Xu H 2010 *Phys. Lett. A* **374** 2163
- [35] Sugiyama H, Saito I 1996 *J. Am. Chem. Soc.* **118** 7063
- [36] Hurst H E, Black R, Sinaika Y M 1965 *Long-Term Storage in Reservoir: An Experimental Study* (London: Constable)
- [37] Guo A M, Xiong S J 2009 *Phys. Rev. B* **80** 035115
- [38] Xiong S J, Xiong Y 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 1407
- [39] Maciá E, Domínguez-Adame F, Sánchez A 1994 *Phys. Rev. B* **49** 9503

Correlation property and electronic transfer property of Cantor-styled artificial DNA sequence^{*}

Liu Xiao-Liang[†] Liang Liang-Wen Xu Hui Li Jiang

(*Institute of Super Microstructure and Ultrafast Process, College of Physics Science and Technology,
Central South University, Changsha 410083, China*)

(Received 26 July 2010; revised manuscript received 27 September 2010)

Abstract

For the Cantor-styled artificial DNA sequence constructed by following the inflation rule $A \rightarrow ABA$ and $B \rightarrow BBB$, using the one-dimensional random walk model and Hurst analysis, we calculate numerically the displacement and its standard deviation, the rescaled range function and the Hurst exponent. The results are compared with those of one-dimensional random binary sequence. We show that Cantor-styled DNA sequence presents correlated behavior, scaling invariability, and self-similarity. In addition, according to the renormalization-group method, we study the charge transfer properties of Cantor-styled DNA sequence, including localization length, charge transmission coefficient and Lyapunov exponent. We find that some resonant peaks can survive in relatively long Cantor-styled DNA sequences, which also implies that there are long-range correlations in Cantor-styled DNA sequences.

Keywords: Cantor-styled DNA sequence, correlation property, charge transmission coefficient, Lyapunov exponent

PACS: 72.10.-d, 02.60.-x

^{*} Project supported by the China Postdoctoral Science Foundation (Grant No. 20080431025), the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 08JJ3005), and the Postdoctoral Science Foundation of Central South University, China (Grant No. 20071025).

[†] E-mail: xlliucsu@sina.com