



2021 年 11 月 4 日

報道機関各位

東京工業大学
豊橋技術科学大学

世界初 DNA を用いた自己修復可能な単分子素子を開発

— 柔よく剛を制す —

【要点】

- DNA 単一分子を電極に接続した電子素子を開発
- 素子が破断しても DNA によって自己修復する特性を実現
- 従来の単分子素子の脆弱性を根本的に解決し、実用化を加速

【概要】

東京工業大学 理学院 化学系の原島崇徳大学院生（博士後期課程 3 年）、西野智昭准教授、豊橋技術科学大学 情報・知能工学系の栗田典之准教授らの研究グループは、**DNA**（用語 1）を用いた新たな単分子素子を開発した。

近年、単一の分子を電極に接続し、微小デバイスとして応用する「単分子素子」の開発が盛んに行われている。これまでに、単分子スイッチや単分子トランジスタといった優れた機能性を有する単分子素子が提案されている。一方で、単分子素子は安定性が低く、実用化の大きな障壁になっている。これは外部からの機械的な振動によって単分子と電極の接続が容易に破壊されてしまうことに起因している。外部からの振動を完全に遮断・回避することは現実的に困難であり、有効な解決策がなかった。そこで本研究グループは、機械的なストレスを緩和するとともに、破壊されても自己修復できる革新的な単分子素子を開発した。DNA 単一分子をジッパーのように開閉させることで機械的な揺らぎを緩和し、さらに生じた破壊を自発的な **DNA の二重鎖形成**（用語 2）によって自己修復することで、機能を回復させることに初めて成功した。これまで提案されたさまざまな単分子素子に本研究で開発した技術を組み込むことで、その実用化が加速度的に進むと期待される。

本研究成果は 2021 年 10 月 1 日（現地時間）、国際学術誌「*Nature Communications*」に掲載された。

●研究の背景

単一の分子を電極間に接続した単分子素子は、分子エレクトロニクス（用語 3）による超微小コンピュータの実現への期待を背景に、微小デバイスや超微量センシングへの応用の観点から注目されている。これまでにダイオードやトランジスタのような優れた機能を持つ単分子素子が多数報告されている。しかし従来の単分子素子は、1 nm（ナノメートル）程度の機械的な揺らぎで容易に破壊されてしまうという根本的問題を抱えていた。分子と電極の結合力を強固にするなどの取り組みがなされてきたが、解決には至っていない。剛直な分子による単分子素子は外部からの機械的なストレスに対応できず、電極との接続が破壊されてしまう。また、1 nm 程度の揺らぎは振動により絶え間なく生じ、これを完全に防ぐことはできない。そのため、これまで単分子素子の安定化を根本的に実現できる方策は見いだされていなかった。

●研究の経緯

あらゆる物質の機械的な破壊は、最も弱い結合から発生する。単分子素子では、単分子と電極を繋ぐ化学結合が最も弱いため、微小な外部振動でもこの結合が容易に破壊されてしまう。そこで研究チームは、水素結合による弱い結合の集合体である DNA を単分子素子へ適用すれば、外部から与えられる機械的なストレスは DNA の開裂によって緩和され、単分子と電極の結合を保持できると着想した。

●研究成果

本研究では、DNA 単分子を横向きに接続した単分子素子（DNA ジッパー）を新たに開発した（図 1）。この単分子素子では、DNA 塩基対が段階的に開裂することによって機械的なストレスを緩和し、分子と金属間の結合を保存できた。さらに、DNA の二重鎖形成によって開裂した構造が自発的に修復されることを見いだした。

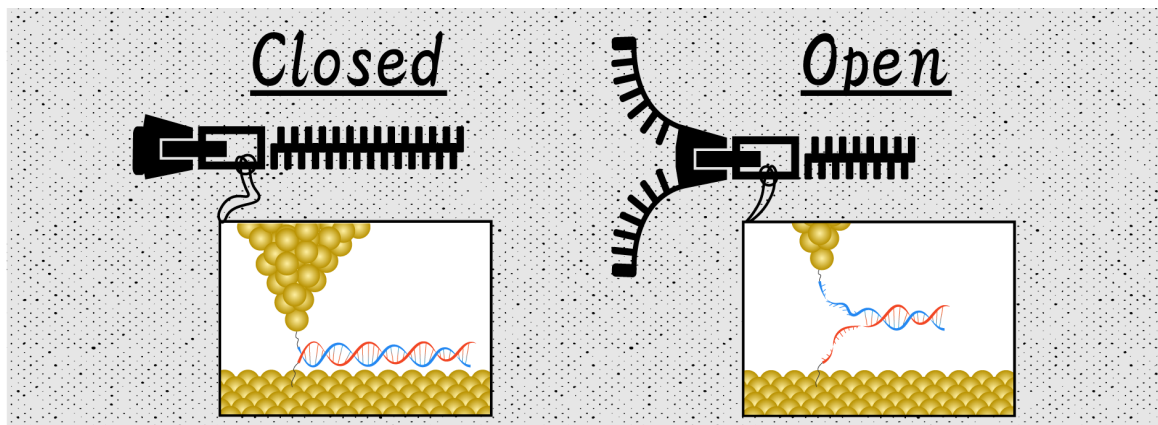


図 1. DNA ジッパーによる単分子素子の図解

実験では、電極に接続した DNA 素子に対して、電極間隔を 30 nm 広げて故意に破壊した後、ジッパーが再生されるかを確認する耐久試験を行った。その結果、DNA ジッパーは最大で 78 回繰り返し復元できた (図 2)。これは、電極の引き上げの際に、DNA の二重らせん構造が部分的に保存され、押し戻しの際に DNA の完全な二重らせん構造が回復することによって自己修復するという動作機構に起因する。この機構は、DNA ジッパーの開閉の分子動力学シミュレーション (用語 4) によっても確認された (図 3)。

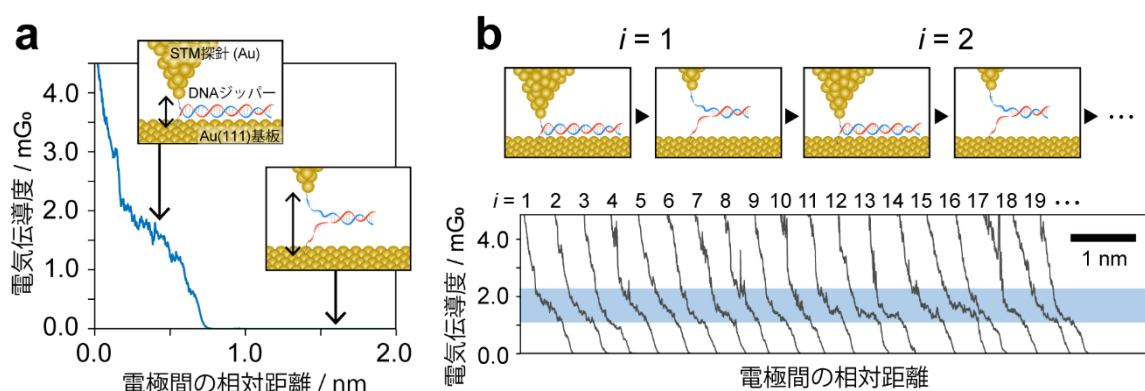


図 2. DNA ジッパーの開閉を伴う電気伝導計測。(a) 走査型トンネル顕微鏡 (STM、用語 5) の基板と探針に DNA ジッパーを架橋させ、電極間距離を広げた際の電気伝導度 (用語 6) を計測。ジッパーが完全に閉じた状態において高い伝導性が見られた。(b) DNA ジッパーの繰り返し形成の実験手順と、計測された伝導度トレース。ジッパーの閉じた状態に対応する伝導シグナル (青色ハイライト部) が繰り返し観測された。

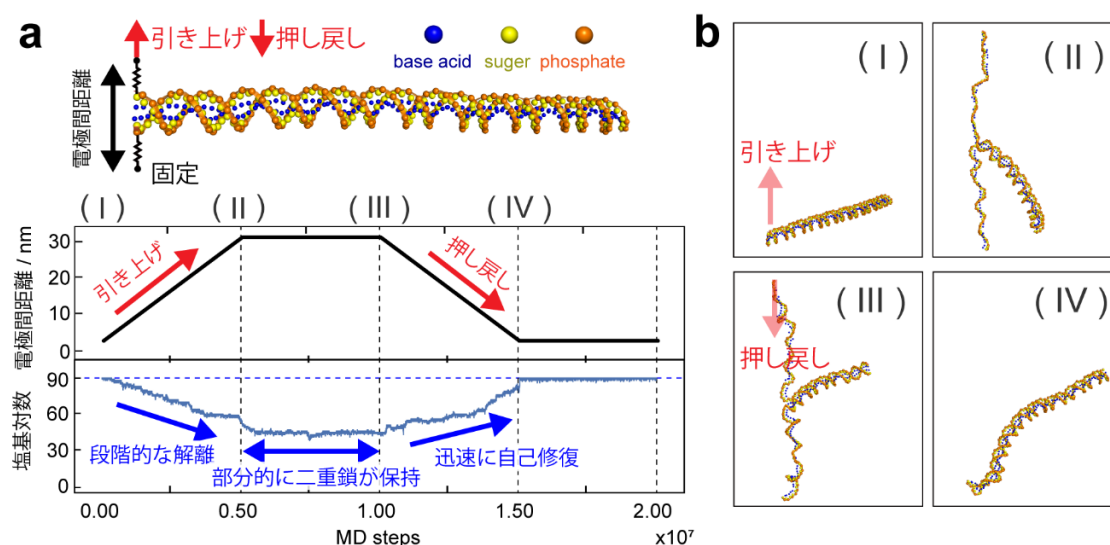


図 3. DNA ジッパーの開閉の分子動力学シミュレーション。(a) シミュレーション中の電極間距離と塩基対数の時系列。(b) 各シミュレーション終了時における DNA の構造のスナップショット。

つまり、DNA ジッパーは塩基対の開裂によって機械的な揺らぎを緩和するだけでなく、優れた自己修復特性によって、破壊された単分子素子を迅速に再生することが明らかになった。従来の単分子素子は 1 nm 程度の小さな機械的な揺らぎでも容易に破壊されてしまうが、今回の DNA ジッパーの開発により単分子素子の機械的安定性は飛躍的に向上した。

●今後の展開

本研究では、機械的なストレスを緩和する機構と自己修復機構を備えた DNA ジッパーを開発することに成功した。これらの機構をこれまで提案されたさまざまな単分子素子に組み込むことで、単分子素子の実用化につながると期待できる。さらに、従来の単分子素子では導電性の確保のために、使用できる分子サイズに制限があったが、今回開発した DNA ジッパーでは使用できる DNA の長さに制約がないことから、本研究は単分子素子の拡張性の大幅な向上ももたらす。これにより、DNA 結合タンパク質などの DNA を含むさまざまな生体システムを単分子素子上に構築可能になった。今後は、DNA ジッパーをプラットフォームとした、単一分子レベルの感度を持つ新たなバイオセンシングデバイスの開発を計画している。

【付記】

本研究は、日本学術振興会 科学研究費助成事業 基盤研究 (B)「刺激応答性分子探針による界面特性の単一分子スケール計測法の開発」(研究代表者 西野智昭) および特別研究員奨励費「光応答性を有する三端子 DNA を用いた単一分子トランジスタの創案と開発」(特別研究員 原島崇徳) の一環として行われた。

【用語説明】

- (1) **DNA**: デオキシリボ核酸の略語。アデニン (A)、チミン (T)、シトシン (C)、グアニン (G) の塩基、糖、リン酸から構成され、塩基配列に生体内の遺伝情報が内包されている生体分子。塩基間の相補的な水素結合により、二重らせん構造を形成する。
- (2) **DNA の二重鎖形成**: アデニンとチミン、グアニンとシトシンがそれぞれペア (塩基対) を組むことで 2 本の DNA から二重鎖が形成される。
- (3) **分子エレクトロニクス**: 物質の最小単位である原子や分子を利用した電気回路を組み立てようとする学術分野。
- (4) **分子動力学シミュレーション**: ニュートンの運動方程式を短い時間間隔で逐次的に解くことにより、原子や分子の運動を予測・再現する手法。
- (5) **走査型トンネル顕微鏡 (STM)**: 原子レベルに鋭い探針を物質の表面に近づけ、トンネル電流を精度良く測定することで、表面の原子レベルの構造や

電子の状態を観察する顕微鏡装置。本研究では、表面と探針間の距離を精密に操作する用途で使用している。

(6) **電気伝導度**：電流の流れやすさ。電気抵抗値の逆数。

【論文情報】

掲載誌：*Nature Communications*

論文タイトル：Single-molecule junction spontaneously restored by DNA zipper

著者：Takanori Harashima, Shintaro Fujii, Yuki Jono, Tsuyoshi Terakawa, Noriyuki Kurita, Satoshi Kaneko, Manabu Kiguchi and Tomoaki Nishino

DOI：10.1038/s41467-021-25943-3

【問い合わせ先】

東京工業大学 理学院 化学系

准教授 西野智昭

Email: tnishino@chem.titech.ac.jp

TEL: 03-5734-2242

FAX: 03-5734-2610

豊橋技術科学大学 情報・知能工学系

准教授 栗田典之

Email: kurita@cs.tut.ac.jp

TEL: 0532-44-6875

FAX: 0532-44-6875

【取材申し込み先】

東京工業大学 総務部 広報課

Email: media@jim.titech.ac.jp

TEL: 03-5734-2975

FAX: 03-5734-3661

豊橋技術科学大学 総務課 広報係

Email: kouho@office.tut.ac.jp

TEL: 0532-44-6506

FAX: 0532-44-1270