

MS0431

单链 DNA 分子穿过石墨烯材料纳米孔的模拟研究

焦豹¹, 胡国庆¹

1. 中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京 100190

E-mail: guoqing.hu@imech.ac.cn

由于其所具有的单分子探测及分析能力, 纳米孔正发展成为新一代 DNA 测序设备。在外加电场作用下 DNA 分子穿过纳米孔将产生离子电流变化。理论上, 不同的阻塞离子电流幅值和阻塞时间可用于区分 DNA 分子的四种碱基, 从而实现 DNA 测序。为了实现单碱基分辨率, 通常要求纳米孔薄到一次只允许一个碱基通过纳孔。基于石墨烯材料的纳米孔由于其亚纳米厚度, 在 DNA 测序中展示了极大优势。我们采用全原子分子动力学模拟方法, 研究了单链 DNA 分子穿过石墨烯/氧化石墨烯纳米孔的动力学行为。我们对外加电场作用下 DNA 过孔速度、DNA 构形变化、离子电流信号等进行了系统模拟。结果表明单链 DNA 分子均会吸附到石墨烯/氧化石墨烯表面。由于 DNA 分子和氧化石墨烯之间更高的吸附能, DNA 分子在氧化石墨烯孔中的迁移速率比在石墨烯孔中低很多。更重要的是, 氧化石墨烯孔有可能实现 DNA 分子的单碱基过孔。

Keywords: DNA 穿孔;石墨烯纳米孔;分子动力学模拟;单碱基测序;

Preferred Presentation Type: