

分子そろばん

—STM を用いて
分子ネックレスを操作する—

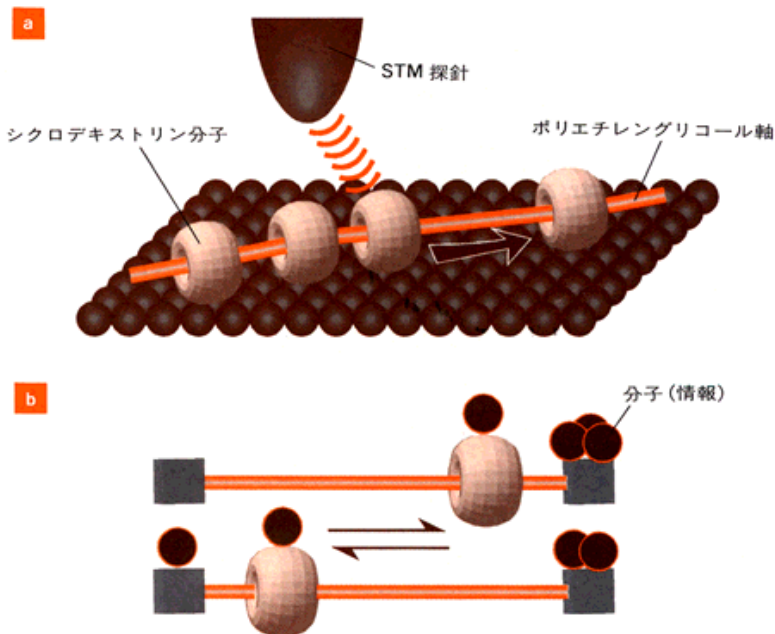
ネックレス状の構造をもつ超分子（ポリロタキサン）の合成と走査型トンネル顕微鏡（STM）技術の進歩により、極限的なレベルでの分子操作が可能となった（H. Shigekawa ほか, *J. Am. Chem. Soc.*, **122**, 5411(2000)）。指の代わりに STM 探針を用い、分子ネックレスのひもに沿って分子玉を自由に移動させることにより、室温・大気中で安定して操作することが可能な分子のそろばんが筑波大学の重川秀実と東京大学先端科学技術研究センターの小宮山 真らによって実現した（図 1a）。同じ手法を用いることにより、分子情報などを輸送することができ分子シャトルを、あらかじめ定めた時刻表に沿って安定に操作することも可能になる（図 1b）。

STM は、先端を非常に鋭く尖らせた探針を試料に近づけて試料表面を走査

し、試料-探針間に流れるトンネル電流強度の空間分布を評価することによって、原子レベルの空間分解能を得ることを可能にした顕微鏡である。トンネル電流を測定するため、試料-探針間にバイアス電圧をかけて観察を行うが、試料-探針間は、1 nm 程度と非常に接近しており、また、トンネル電流に寄与する領域が非常に狭いために、電場・電流密度は非常に大きな値になる。通常、半導体などでは、1 V 程度のバイアス電圧、100 pA（ピコアンペア、 10^{-12} A）程度のトンネル電流の設定で測定を行うが、有機材料や吸着系が測定対象の場合は、バイアス電圧やトンネル電流を、mV, pA 程度に抑える工夫がなされる。これは、バイアス電圧やトンネル電流による試料の変化を防ぎ、対象の構造を安定な状態で観察するためである。したがって、逆に、高い電圧をかけたり、大きなトンネル電流を流すことによって、試料表面の原子・分子の状態を意識的に変化させることができる。その際、条件をうまく選べば、状態の変

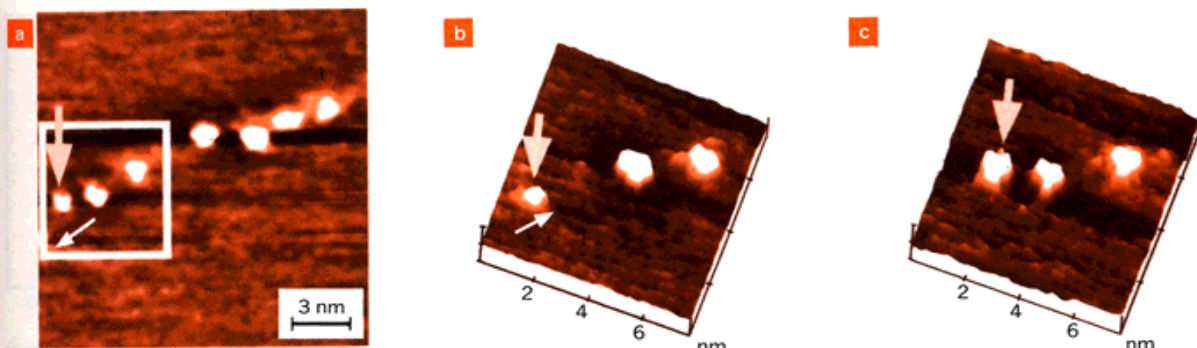
今月の FLASH

- 分子そろばん：STM を用いて分子ネックレスを操作する
- トポイソメラーゼ II の作用機構：DNA の 1 分子操作による解析
- 高性能の冷却用熱電材料
- 細胞表面につくった魔法の手
- 有機物でできた高速電気光学変調器



分子の軸があるため、安定した操作が可能となる (a)。分子などを付加すれば、定められた場所を時刻表に従って移動し、情報を輸送する分子シャトルが実現する (b)。

図 1 STM 探針を用いて分子ネックレスの個々の分子を操作する模式図



大きな矢印で示された分子(シクロデキストリン)が、小さな矢印の方向に分子軸に沿って操作され、1 往復している (H. Shigekawa ほか, *J. Am. Chem. Soc.*, **122**, 5412 (2000) より)。

図2 分子そろばんの操作の STM 像

化を目的に合わせて思い通りに制御することが可能になるものと期待される。

原子・分子の操作は、STM の開発後、IBM 社のグループによって、金属上に吸着させた Xe 原子や CO 分子を、STM の探針で制御して文字や絵をかかせることから始まった。しかし、原子・分子を操作するためには、極低温・超高真空という特別な条件が必要不可欠であった。その後、Cu の上に吸着させたサッカーボール状のフラレン、 C_{60} という大きな分子を対象として熱拡散を抑え、Cu 基板のステップ (結晶表面にある階段状構造) が C_{60} を固定するガイドレールに使われて、室温における分子操作の可能性が示された。ステップに沿って C_{60} を並べ、室温で安定なそろばん状の構造が作製されている。しかし、ガイドレールのないテラス (平坦な結晶面) の上では、やはり不安定で方向が定まらず、安定した操作はステップのみに限られる。しかも、清浄な Cu の面を準備するためには、超高真空が必要とされる。

一方、新しく実現された分子そろばんでは、ドーナツ状のシクロデキストリン分子がポリエチレングリコール分子を軸として連なったネックレス状の構造をもつ超分子 (ポリロタキサン) が対象とされた。分子の軸が存在するため、これまでの問題点を解消し、大気中、常温での安定した操作が可能となっている。図1に操作の模式図を示す。STM 探針を用

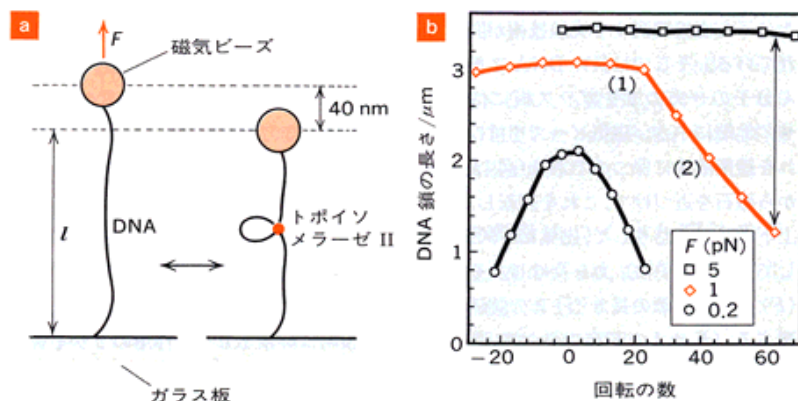
いてポリエチレングリコールの軸に通された個々のシクロデキストリン分子を、軸分子に沿って移動させる。ポリエチレングリコールの軸が存在するために、安定した動作が可能となるだけでなく、目的とした場所に、道をそれることなく、時刻表通りに操作することが実現されている。

図2に実際の操作の様子 (STM 像) を示す。図2aの四角で囲んだ領域の分子が操作されている。図2bで左斜め下に移動したシクロデキストリン分子が、図2cではもとの場所に戻る。この一連の操作は、分子が軸をもつことにより、はじめて可能になるものである。

このほか、二つのシャトルを同時に移動させたり、分子の軸を操作してガイドレールを目的とする場所に自由に設置する可能性も示された。次世代の分子デバイス開発において新しい一歩が踏み出されたといえる。

トポイソメラーゼ II の作用機構 — DNA の 1 分子操作による解析 —

DNA トポイソメラーゼ II は、生物に広く存在する ATP (アデノシン 5'-三リン酸) 要求の酵素で、DNA 二本鎖の両方を一時的に切断し、他の DNA 鎖をその切断箇所にもってきてそこを通過させる、という化学反応を触媒する。これに



a) 実験の模式図。b) 回転の数と DNA 鎖の長さの関係。

図1 DNA 二重らせんの鎖の長さ (l) と引伸ばす力 (F) と軸のまわりの回転数との関係 (T. R. Strick ほか, *Nature (London)*, **404**, 901 (2000) より)