

3Ca01 修飾されたDNAのエナジエティクス

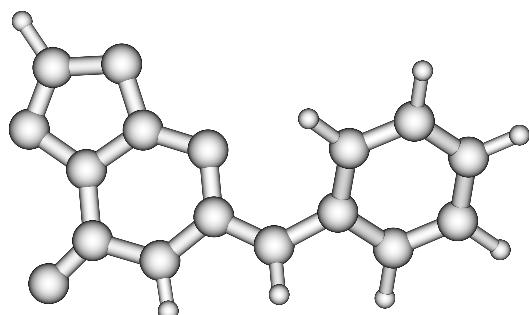
(JST^a、筑波大物質工^b、京都大工^c、PRESTO^d)

○ 横島智^{ab}、岡田朗^b、堂野主税^c、中谷和彦^{cad}

DNAは遺伝情報の担い手として極めて重要であるが、一方で分子デバイスとしての応用の面からも注目されている。配列を制御できること、小さな空間しか占めないこと、ワトソン－クリックペアを作ることを利用して、望んだ構造を作りだせることなどデバイスとして魅力的な性質を持っている。またDNAは、その塩基に存在するπ軌道により伝導性をも示す。[1]

しかしながら、DNAをデバイスとして利用するにはいくつかの問題も存在する。問題点の1つとして、DNAにおいてグアニン2個あるいは3個が同じ鎖上にひと続きに並んでいるとき、そこにホールがトラップされ、その後の反応でDNAが壊れてしまうという現象が見られる。この現象を解明することは、DNAの修復という生医学的応用にはもちろんのこと、デバイスとしてDNAを使う際にも、極めて重要なこと。

これと関連して、最近、京都大学の齋藤・中谷グループによりフェニル基付きグアニンにおける、ホールトラップに関する実験がなされた。[2] 実験においてDNA二重鎖で、(i) フェニル基付きグアニンでの酸化分解の抑制、(ii) フェニル基付きグアニンの近くにあるグアニンでの酸化分解の抑制、が観測された。



本発表では、詳細な電子状態計算を行なうことにより、この実験結果を説明できたので、ここに報告する。

References

- [1] D. Dekker and M. A. Ratner, Phys. World **14**, 29 (2001).
- [2] K. Nakatani, C. Dohno, and I. Saito, J. Am. Chem. Soc. **124**, 6802 (2002).