

## 2P057 1重鎖及び2重鎖DNAの構造と電子物性の理論的解析

(豊橋技科大院工<sup>1</sup>・神戸大院自然科学<sup>2</sup>) ○出立兼一<sup>1</sup>、夏目貴行<sup>1</sup>、田中成典<sup>2</sup>、栗田典之<sup>1\*</sup>

\*E-mail : kurita@cochem2.tutkie.tut.ac.jp

生物の遺伝情報を解析し、医療や生命科学に役立てる技術は、21世紀に入りますます重要性を増しており、それらの基幹技術の一つとして注目されているのがDNAチップである。従来の蛍光検出型DNAチップでは、コストや精度の面で問題があるため、より安価で高精度な電流検出型DNAチップに期待が集まっている。しかし、DNA中の電荷移動機構は未解明な部分が多く、より高精度なDNAチップの開発におけるボトルネックになっている。

DNAチップ上には、サンプルDNAと相補的に結合した2重鎖DNAと1重鎖DNAが存在し、実験[1]によると、1重鎖の方が2重鎖よりも電流が流れにくいとされている。本研究では、この原因を理論的に解明する目的で、1重鎖及び2重鎖DNAの構造と電子物性を詳しく解析した。

計算対象として、AT及びGC塩基対から成る2重鎖と、同一塩基のみで構成される1重鎖を考え、汎用分子力学・動力学計算プログラムTINKERのAMBER力場を用い、一様溶媒近似での分子動力学計算を行い、1重鎖及び2重鎖DNAの安定構造を求めた。さらに、それらの構造に対し半経験的分子軌道法を用いて電子状態を解析し、得られたHOMOとLUMO周辺のエネルギーレベルならびに電子及びホールに関する移動積分を求めた。最後にLandauer公式に基づく電気伝導特性解析プログラムにエネルギーレベルと移動積分の値を入力し、DNAに対する電流電圧特性と透過係数を求めた。その結果、GC塩基対から成る2重鎖DNAは、GあるいはCのみから成る1重鎖よりも約10~1000倍電流が流れることを明らかにした。結果の詳細は、当日のポスターで紹介する。

本研究は科学技術振興機構の計算科学技術活用型特定研究開発推進事業（ACT-JST）（研究課題「DNAのナノ領域ダイナミクスの第一原理的解析」）の援助を受けて行われた。

(文献)

[1] T. J. Meade and J. F. Kayyem, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **34**, 352 (1995).