

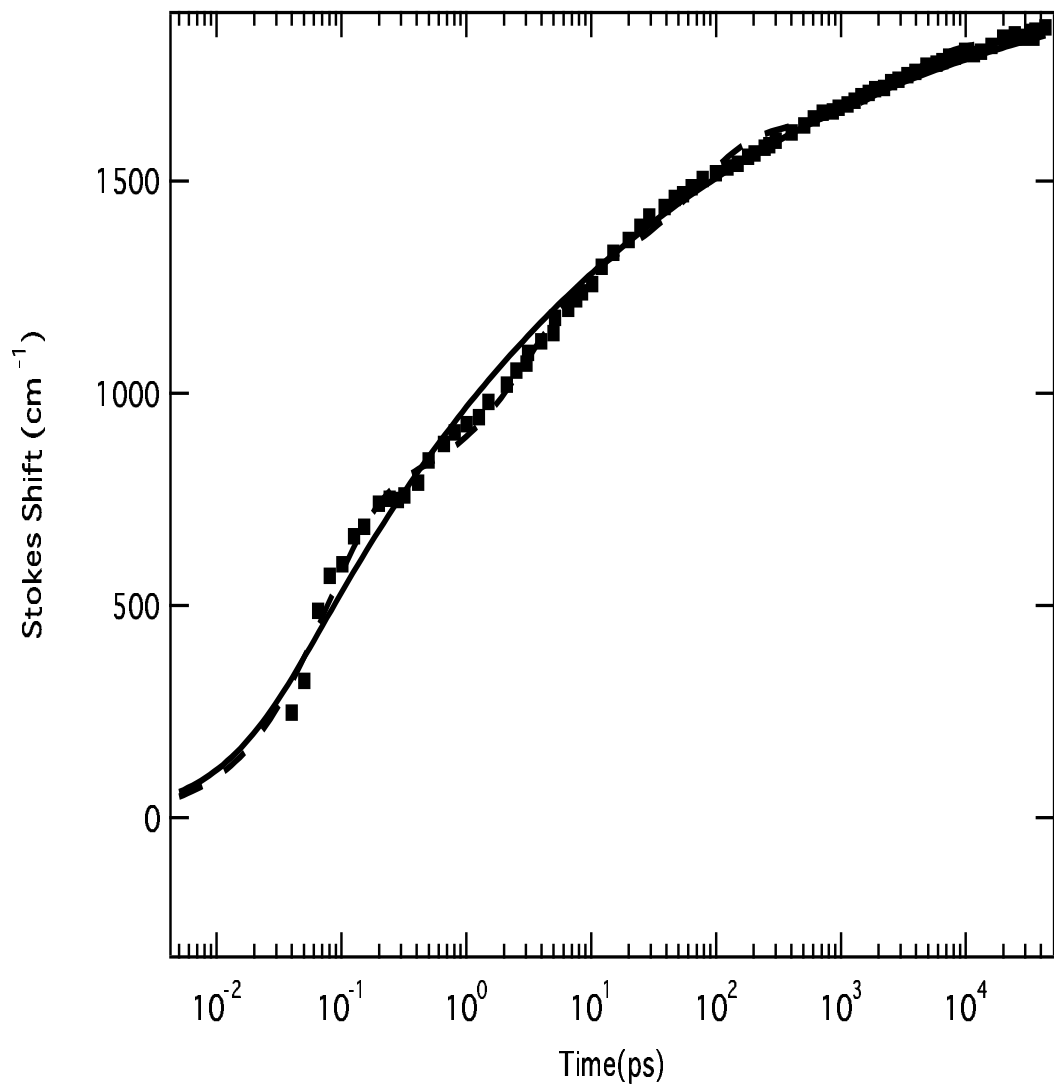
## DNA の溶媒和ダイナミクスに見られる 長時間緩和に対する理論式

産業技術総合研究所、 ○ 関和彦、立矢正典

最近、Zewail や Berg 達は DNA 中のクマリン色素の溶媒和について、ピコ秒からマイクロ秒の長時間にわたりべき関数時間依存性を観測した [1]。そのストークスシフトは大きく、 $2000\text{cm}^{-1}$  におよぶと推定されている。単純液体中での色素の溶媒和は時間について指数関数的であり、時定数はピコ秒程度で、ストークスシフトは  $500\text{cm}^{-1}$  以下である。代数ベキによる大きな溶媒和、そして小さな代数ベキの指数は、DNA と関係している事は確実であるが、DNA のどのような性質によって引き起こされているのかは分かっていない。

クマリン色素を励起すると、色素内で電荷移動が起こる。色素周囲の溶媒のみならず、DNA 分子もクマリン色素の新しい電荷分離状態を安定化させるように再配向する。ストークスシフトは振動や慣性項を無視できるピコ秒より長い時間で測定されている事から、様々な緩和時間の指数緩和の重ね合わせであると考えられる。DNA は複雑な分子であり、再配向についていろいろな緩和時間がある。緩和時間はアーレニウス式で表され、緩和時間の活性化エネルギーは指数関数分布をしていると仮定すると、長時間にわたり、DNA の溶媒和の実験結果を良く再現する結果を得た。又、ストークスシフトのみならず、発光の幅の時間変化も観測可能である事から理論による予測を行った。

1) D. Andreatta, J.L.P. Lustres, S.A. Kovalenko, N.P. Ernsting, C.J. Murphy, R.S. Coleman and M.A. Berg, *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 7270 (2005).



点はストークスシフトの実験結果。実線は理論式によるフィッティングの結果。破線は、実線の理論式を更に改良した結果。(詳細は講演予定)