

# Guanine - Cytosine(G-C)塩基対のプロトン移動における温度依存性と 同位体効果

○関 悠佑 藪島裕介 高柳敏幸 (埼玉大学基礎化学科)

G-C 塩基対は、生体内の DNA を構成する要素の一つである。G-C 塩基対は、電子付着することでまず平面構造が崩れ、その後 Guanine 側から Cytosine 側にプロトンが移動して安定化することが分かっている。本研究では、このプロトン移動反応に注目した。水素は非常に軽いため、プロトン移動においてトンネル効果や零点振動エネルギーといった量子的効果が現れる。核の量子的な効果を考慮して実時間の分子シミュレーションを行うために、リングポリマー分子動力学法(RPMD)法を用いて量子動力学計算を行った。ポテンシャルエネルギー曲面は、LC-DFT 法による計算結果を基に、EVB 法によって作成したものをを用いている。

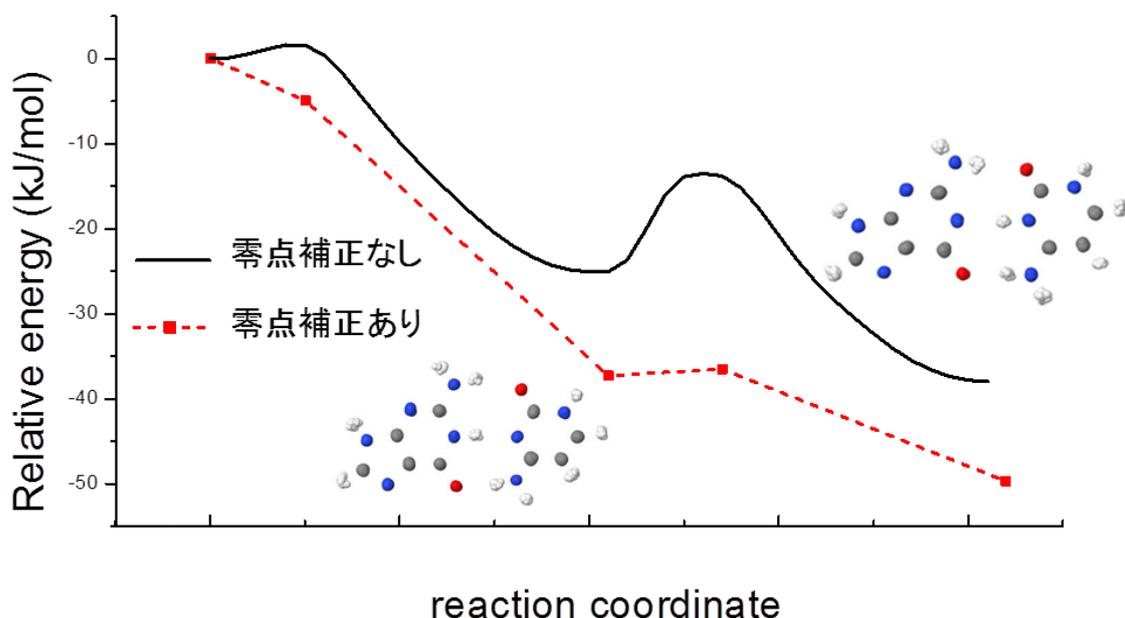


Fig. 1 G-C 塩基対の反応の概略図

零点振動を考慮していない場合のエネルギー(黒線)と考慮した場合のエネルギー(赤線)。零点振動を考慮したものは平衡構造 3 点とその間の遷移状態 2 点のみを計算した。縦軸は電子付着した直後の G-C 塩基対のエネルギーを 0 としている。分子モデルは G-C 塩基対の核を量子的に扱った時の描像である。

核を古典的に扱った場合と、核を量子的に扱った場合の動力学計算を行った結果を比較すると、古典計算に比べて量子計算ではプロトン移動反応が加速することが明らかとなった。その要因の一つとしては、核を量子的に扱うことで零点振動エネルギーによりプロトン移動反応におけるエネルギー障壁が低くなることが挙げられる(Fig. 1)。そこで、プロトン移動反応における量子的な効果についてより深く理解するために、温度を変えて同様の動力学計算を行った。また、同位体効果を調べるためにプロトン移動する水素原子を D に置換して同様の計算を行った。詳しい結果は当日発表する。