

核酸塩基の相対配置の探索

○向日友宏¹,高田谷吉智¹,山門英雄²,時子山宏明³,大野公一^{4,5}

(和歌山大院システム工¹,和歌山大システム工²,HPC システムズ株式会社³,
量子化学探索研究所⁴,東北大院理⁵)

序 生物にとって、DNAは重要な物質である。DNAの2重螺旋構造を形成する核酸塩基である、Adenine(A),Guanine(G),Cytosine(C),Thymine(T)の特異な1対1の相補的相互作用に関する知見を得るため、GRRM/SCC-DFTB¹⁾プログラムを用い、核酸塩基の相対配置を検討している。今回G-C間の構造について報告する。

方法 探索には超球面探索法²⁾を、電子状態の計算はDFTB^{3,4)}(Density Functional tight binding)法を用い、パラメータにはmio-1-1を用いた。初期配置は、G,C分子を、同一平面上に並べた構造をSCC-DFTB法で構造最適化した構造から出発した。今回は、非調和下方歪み(Anharmonic Downward Distortion : ADD)の大きい経路を3つおよび4つまでたどるようにオプション(LADD = 3,4)を設定した。

結果と考察 LADD = 3では平衡構造(EQ)が30個見付き計算が終了し、LADD = 4では、EQが238個見付き探索は現在継続中である。DNA中で実際に見られるG-Cの相対配置をSCC-DFTB法で最適化した構造、および今回自動で探索された代表的な構造を図1に示す。今回の探索では、Cytosineの水素の一つが移動した構造が多く見付きしている(図1(c)、(d))。実際のDNA(デオキシリボース・リン酸鎖付き)中で見られるG-C間の水素結合による相対配置⁵⁾は、現在探索中であるが、GRRM/SCC-DFTBを用いた探索により、核酸塩基の相対配置の候補を自動探索することが可能であると考えられる。

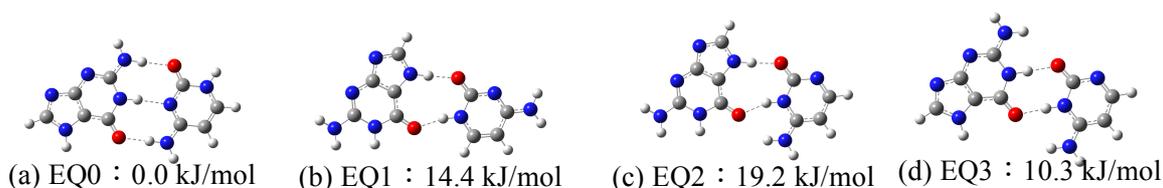


図1 GuanineとCytosineの相対配置。

(a) : DNA中で知られている相対配置について最適化した構造。

(b)~(d) : 今回の探索で見つかった相対配置。(c),(d)ではCytosineの水素の一つが移動している。

¹⁾H. Tokoyama, H. Yamakado, S. Maeda and K. Ohno, *Chem. Lett.*, 2014, **43**, 702.

²⁾K. Ohno and S. Maeda, *Chem. Phys. Lett.*, 2004, **384**, 277; S. Maeda and K. Ohno, *J. Phys. Chem. A*, 2005, **109**, 5742; K. Ohno and S. Maeda, *J. Phys. Chem. A*, 2006, **110**, 8933.

³⁾D. Porezag, Th. Frauenheim and Th. Kohler, *Am. Phys. Soc.*, 1995, **51**, 12947.

⁴⁾B. Aradi, B. Hourahine, and Th. Frauenheim, *J. Phys. Chem. A*, 2007, **111**, 5678.

⁵⁾P. Jurecka and P. Hobza, *J. Am. Chem. Soc.* 2003, **125**, 15608.