

RD05

DNA のナノ領域ダイナミクスの第一原理的解析

田中 成典

東芝研究開発センター 新機能材料・デバイスラボラトリー

ナノテクノロジーやバイオ分野で経験的知見によらない第一原理的コンピュータシミュレーションが可能となってきた。平成 13 年 11 月よりスタートした科学技術振興事業団・計算科学技術活用型特定研究開発推進事業 (ACT-JST) の研究開発課題「DNA のナノ領域ダイナミクスの第一原理的解析」プロジェクトでは、ナノ領域における DNA の電荷移動と転写制御のダイナミクスを高速高精度分子軌道法・分子動力学法及びそれらから導かれる有効理論等に基づき専用並列計算エンジン等を援用して第一原理的に解析する手法を開発し、分子デバイスやポストゲノム研究の基盤となる技術・知見を提供することを目指している。本プロジェクトは、東芝、国立医薬品食品衛生研究所、産業技術総合研究所、豊橋技術科学大学、筑波大学の 5 研究機関に属する 12 名の研究分担者と 28 名（うち海外 18 名）の研究協力者により構成されている。

