

演 題	クロモフォアを有する DNA 二重螺旋の分子動力学シミュレーション	
発 表 者 ( 所 属 )	○佐々和洋 (姫路工大院, 工), 宇野健 (広島県立大, 経営), 林治尚 (兵庫県立大, 学術総合情報センター), 山名一成 (兵庫県立大, 工), 中野英彦 (兵庫県立大, 工)	
連 絡 先	671-2201 兵庫県姫路市書写 2167 姫路工業大学 応用化学科分子設計学研究室 中野英彦先生気付	
キ ー ワ ー ド	クロモフォア, DNA, AMBER, 分子動力学シミュレーション	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 など	光収集アンテナやゲノム認識分子としての利用が期待される, クロモフォアを導入した DNA 鎖について, 定常状態における分子動力学シミュレーションを行い, DNA 二重螺旋の構造やクロモフォアの配向性等の解析を行った.	
環 境	適 応 機 種 名	DOS/V(AT 互換)機
	O S 名	RedHat 7.3J
	ソ ー ス 言 語	
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 ( 右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い )	・日本コンピュータ化学会の無償利用 ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス, 出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 ・未定	具 体 的 方 法

## 1. 緒言

何らかの機能性を有する残基および修飾体を順序と間隔を制御して配置することにより, 単体では為し得なかった機能を持つ分子を構築することが期待できる. 例えば, 複数の光機能性クロモフォア (発色団) を分子内および空間内に制御して配列化することで, 高効率での光エネルギー伝達が可能となり, 光捕集アンテナやモレキュラーワイヤーなどへの応用が可能であると思われる. また, シーケンス認識能や二重鎖の剛直性に着目し, DNA 二重螺旋上にクロモフォアを配列させたクロモフォア・アレイにおいて, ドナークロモフォアからアクセプタークロモフォアへの光エネルギーのベクトル移動が実験的に確認されている. しかし, クロモフォアを有する DNA 二重螺旋の構造や各クロモフォアの挙動については明らかになっておらず, 最適なクロモフォア・アレイの構造予測や, より高性能なクロモフォアの開発には, それらを分子動力学法を用いて解析することは, 有効であると思われる.

そこで, 本研究では, ドナークロモフォアとしてクマリン (U(C)), アクセプタークロモフォアとし

てタムラ (**TAM**), メディエータークロモフォアとしてフルオロセイン (**Flu**) を有する, DNA 二重螺旋分子について分子動力学シミュレーションを行った. (Fig.1) DNA 二重螺旋は **U(C)** と **TAM** を両端とする 20 残基からなり, **Flu** の導入部位によるクロモフォアの挙動の変化を調べるために, **Flu** を DNA 鎖の 5'末端側から 6 番目 (CFT1), 11 番目 (CFT2), 17 番目 (CFT3) の残基に導入し, 完全総補鎖とした 3 種類の分子を比較検討した. 今回は, クロモフォア部位を定常状態として扱った.

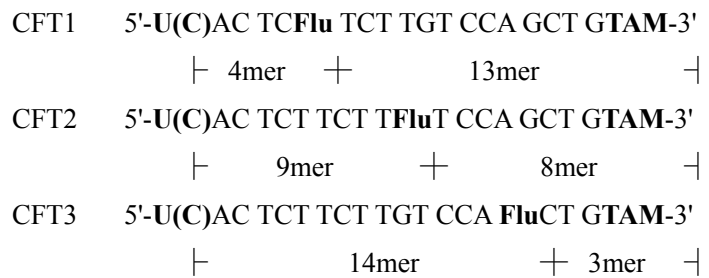


Fig.1 Sequences of DNA with chromophore (CFT1, CFT2, CFT3)

## 2. シミュレーション

シミュレーションには AMBER 7.0 を用い, 全ての系において水溶媒とカウンターイオンを挿入し, 極小化計算を行った後, 分子動力学計算を行った. 各条件については以下に示す.

- Step 数       1,000,000 step (1 ns)
- 温度         300 K
- 各クロモフォア部位は定常状態とする
- 水溶媒およびカウンターイオン ( $\text{Na}^+$ ) 挿入

また, 各クロモフォアの作成には, MOLDA for Windows を使用し, MOPAC にて最適化および電荷の算出を行った. さらに, 各原子タイプの定義に対しては AMBER の Parm99 より類推し指定した.

詳細な結果については, 当日発表する.

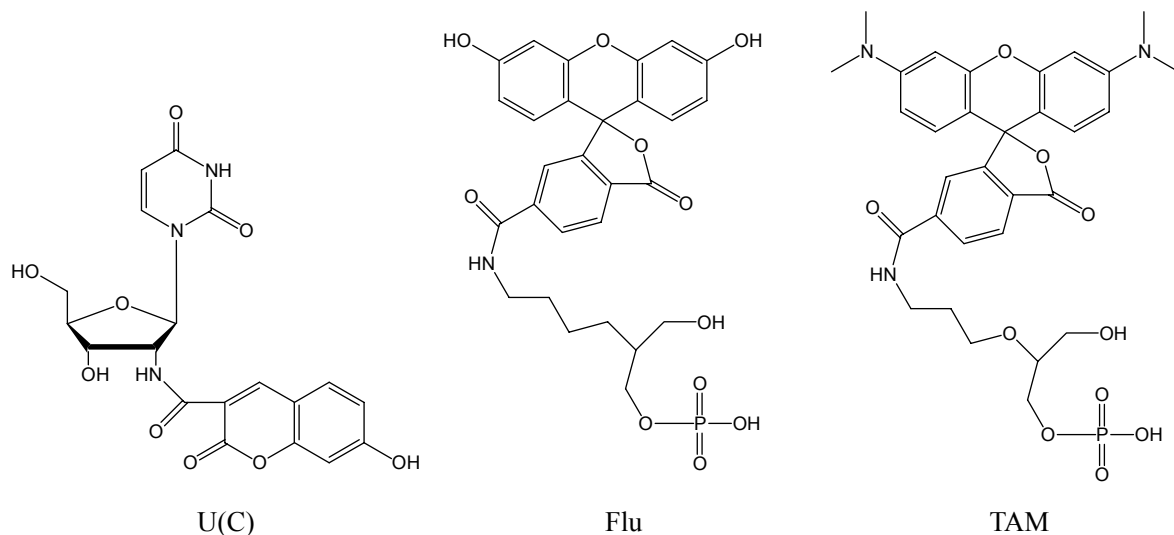


Fig.2 Structure of chromophore (U(C), Flu, TAM)