

自己評価報告書

平成23年5月6日現在

機関番号：33905

研究種目：基盤研究 (C)

研究期間：2008 ~ 2011

課題番号：20550024

研究課題名 (和文) 核酸の分極ポテンシャルの開発

研究課題名 (英文) Development of polarization potential of nucleic acid

研究代表者

中川 節子 (NAKAGAWA SETSUKO)

金城学院大学・生活環境学部・教授

研究者番号：50050711

研究分野：量子生物学

科研費の分科・細目：基礎化学・物理化学

キーワード：分極ポテンシャル、多中心分極率、分極一電子ポテンシャル、核酸、ヌクレオチド

1. 研究計画の概要

(1) 分極一電子ポテンシャル最適化法プログラムの拡張を行い、核酸セグメントに関して多中心分極率の決定を行う。

(2) 核酸セグメントの分極ポテンシャルを構築する。ヌクレオチドと水分子等の相互作用エネルギーを量子化学的に算出し、ポテンシャルエネルギー面を再現するパラメータセットを決定する。

(3) 決定した分極ポテンシャルを用い、核酸の水モデルの分子動力学シミュレーションを実施し、作成したポテンシャルの評価を行う。

2. 研究の進捗状況

核酸のヌクレオチドモデルについて、分極一電子ポテンシャル(POP)最適化法を用いて、多中心分極率の決定を行った。より大きなシステムの分極を再現するかを検証する目的で、三つのヌクレオチドを含むモデルの計算を試みた。計算モデルは、CCCGGGの中央コア構造を持つDNA二重螺旋のX線結晶構造解析の原子座標 (PDB-ID: 1ZF1) を用い構築した。水素原子の座標は構造最適化計算によって決定した。

POP最適化法では、分子表面にテスト電荷を置いて、その位置を変えながら分子表面のPOPを計算して参照のポテンシャルとする。三つのヌクレ

オチドを含む分子では、量子化学計算量が膨大であったが、pCpCpCとpGpGpGに関する計算を終了させることができた。比較的計算が容易なB3LYP/6-31+G*を用いた。

開発しているPOP最適化プログラム(POPFIT)は、もともと小型の分子を想定してコーディングを行っていたので、大型分子に適用できるよう大幅な拡張・改変を行った。また、周辺プログラムの整備も行った。POPFITでは、分子内誘起双極子間および分子内誘起双極子一点電荷の影響を取り込むことができる。改良したプログラムを用い、pGpGpGとpCpCpC分子の分極項パラメータの決定を行った。分子内誘起双極子間および分子内誘起双極子一点電荷の計算では、近接する原子間において相互作用をダンピングする必要があるが、シンプルなモデルで良好な結果が得られることが分かった。分子内誘起双極子の効果は、結合を形成している原子間(1-2)では1/10にダンピングし、その他(1-3以上)は含めた方がよく、分子内点電荷-誘起双極子の効果は全く含めない方がよいという結果であった。パラメータはH、C、N、O、Pの五種類でよく、偏差は10%程度であった。pGpGpGとpCpCpC別に最適化を行ったが、類似した値に収束しており、

塩基の違いがあっても同一のパラメータの使用が可能であると推測された。

3. 現在までの達成度

②おおむね順調に進展している。
(理由)

本研究において最もオリジナリティがある部分は、核酸セグメントに関して分極一電子ポテンシャル最適化法を用い多中心分極率パラメータの決定を行う点にある。最適化プログラムの大幅改良を行い、当初予定していたよりは大きい三つのヌクレオチドを含む分子に適用し、分極率パラメータの決定に成功している。

4. 今後の研究の推進方策

核酸セグメントの分極ポテンシャルを構築する。現在、ヌクレオチドと水分子またはイオンの相互作用エネルギーを量子化学的に算出中であり、引き続きポテンシャルエネルギー面を再現するパラメータセットを決定する段階に進む。また、三つのヌクレオチド分子同士が相補的に相互作用するモデルについても再現性を検討する必要があり、追加の量子化学計算を行う。最終的には、十分吟味した分極ポテンシャルを用い、核酸の水和モデルの分子動力学シミュレーションを実施し、作成したポテンシャルの評価を行う予定である。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計0件)

[学会発表] (計0件)

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況 (計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

[その他] 特になし