

分子を支配する方程式を用いて 核酸塩基の失活ダイナミクスを 解き明かす

小林 優斗

北海道大学 大学院 総合化学院
量子化学研究室



未来社会のあるべきかたち

- ◆ 基礎科学研究の発展による医療・産業分野への還元
や文化的な成長
- ◆ 基礎科学分野の研究のさらなる活発化

1. 分子を支配する方程式とは？

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

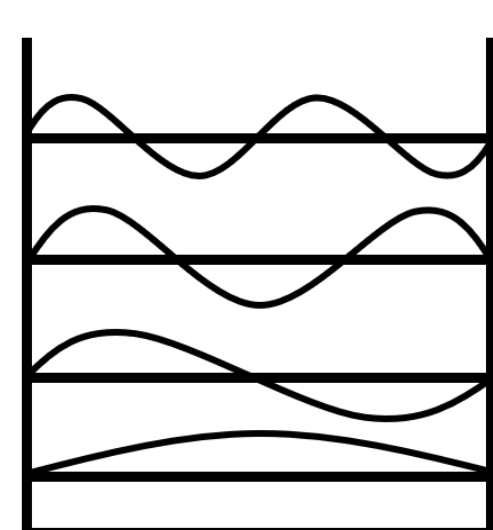
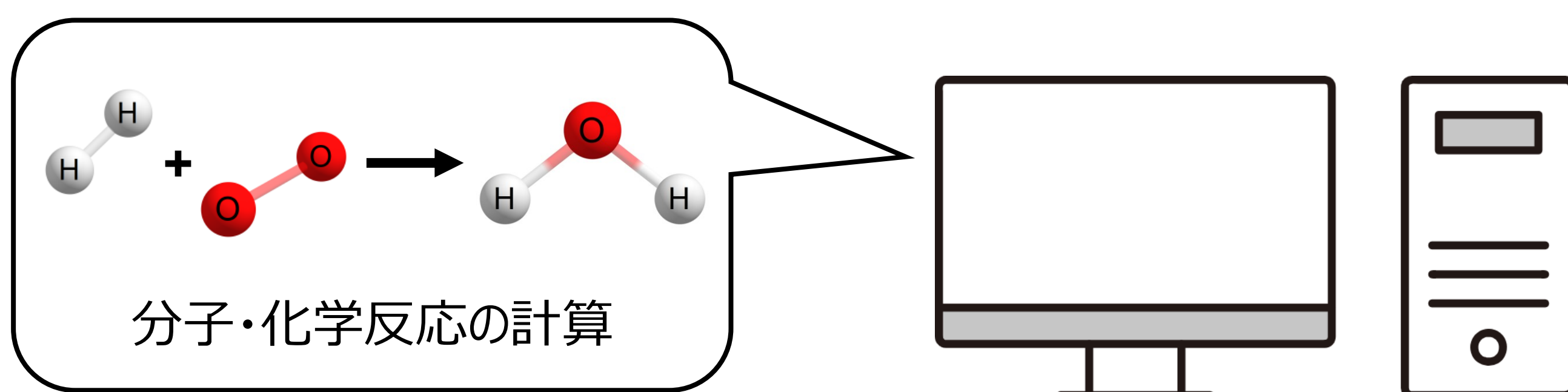
運動エネルギー項 位置エネルギー項

シュレーディンガー方程式

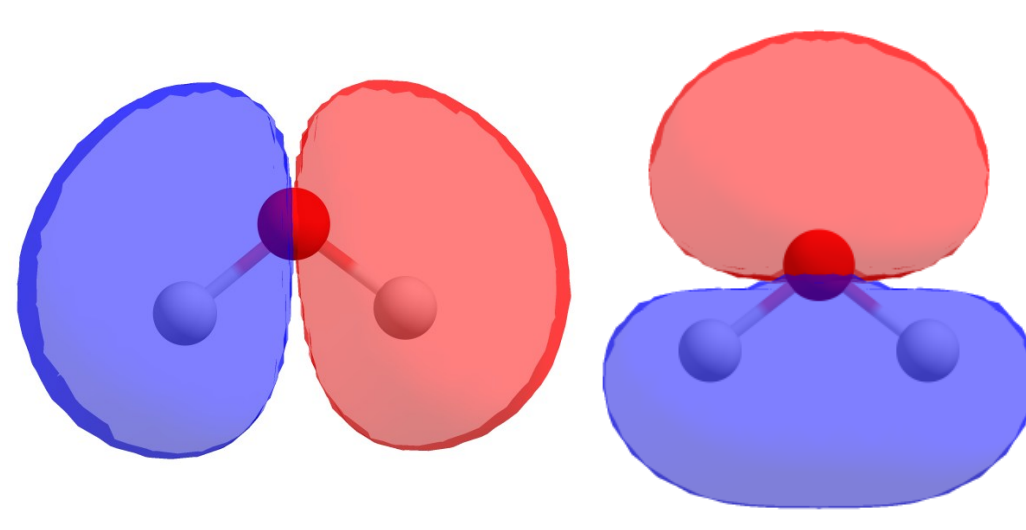
ミクロな粒子の運動を記述する方程式
(電子、原子核、素粒子etc.)

この方程式を解くことで粒子がどのように運動するのが分かる！

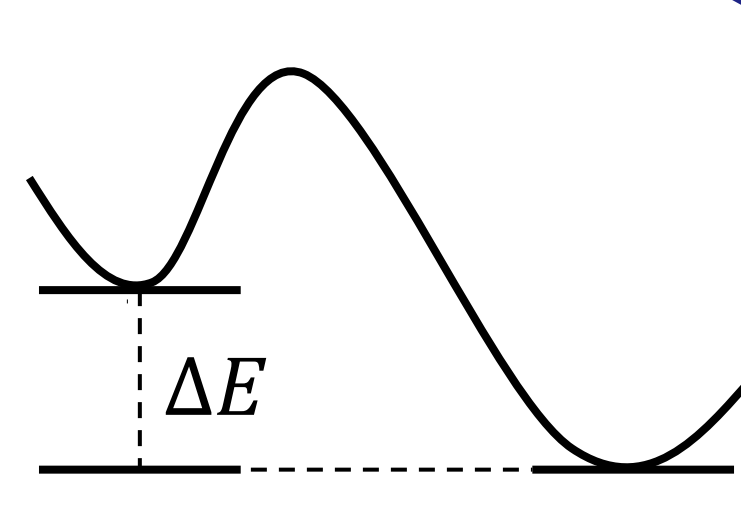
この方程式を分子や化学反応にも適用し、コンピュータで計算する。



量子化された
エネルギー



分子軌道

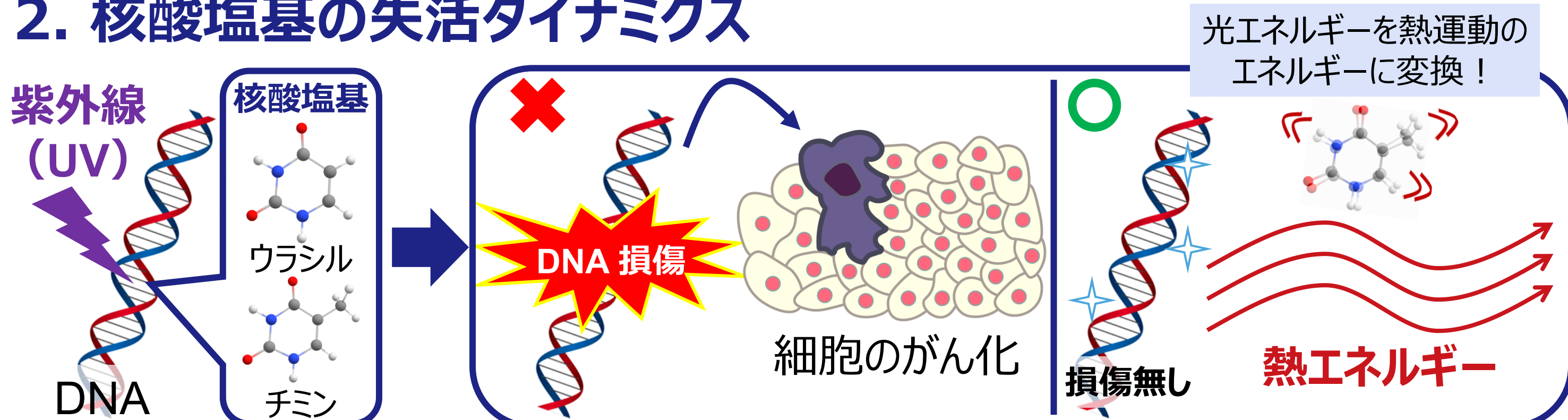


化学反応における変化

など他にもいろいろ解析可能！

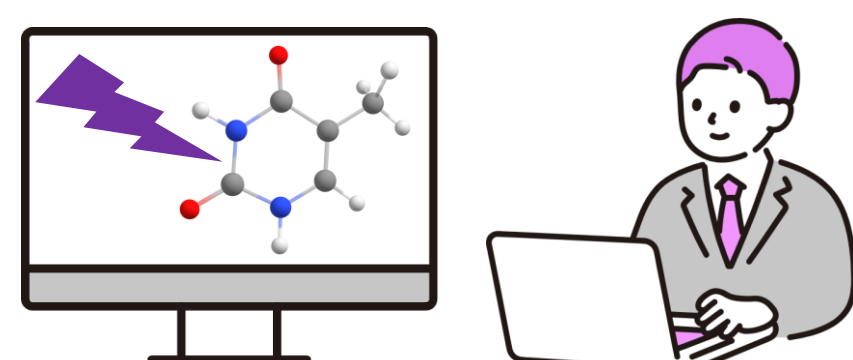
このように、コンピュータを用いてシュレーディンガー方程式を解き、分子の運動や化学反応を分子レベルのシミュレーションで解析する学問を**量子化学**といいます。

2. 核酸塩基の失活ダイナミクス



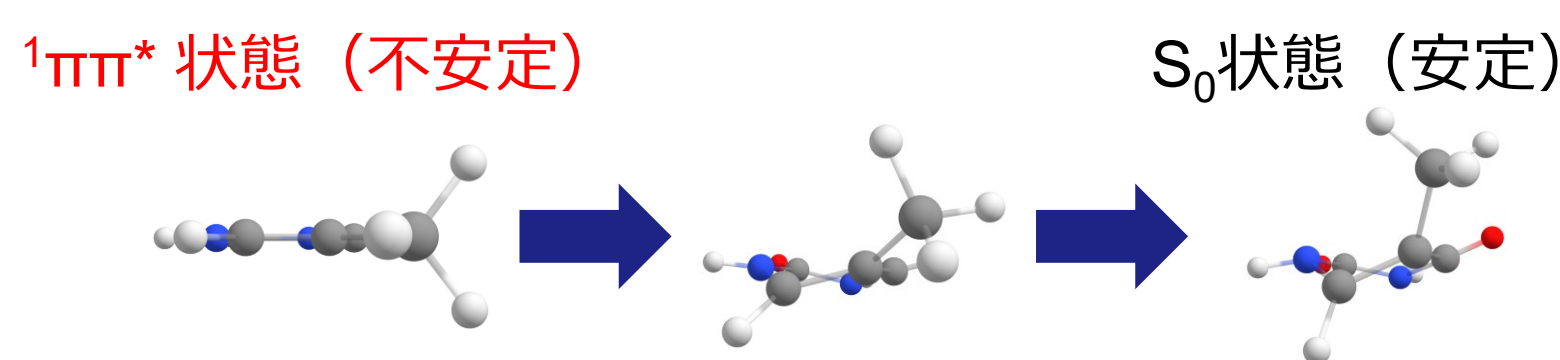
DNA・RNA は紫外線の光エネルギーを熱エネルギーに変え、高速に逃がすことで損傷を防ぎます。これはDNA・RNA 中の核酸塩基の**失活ダイナミクス**による防御機構です。

3. 量子化学計算による核酸塩基の失活ダイナミクスの解明

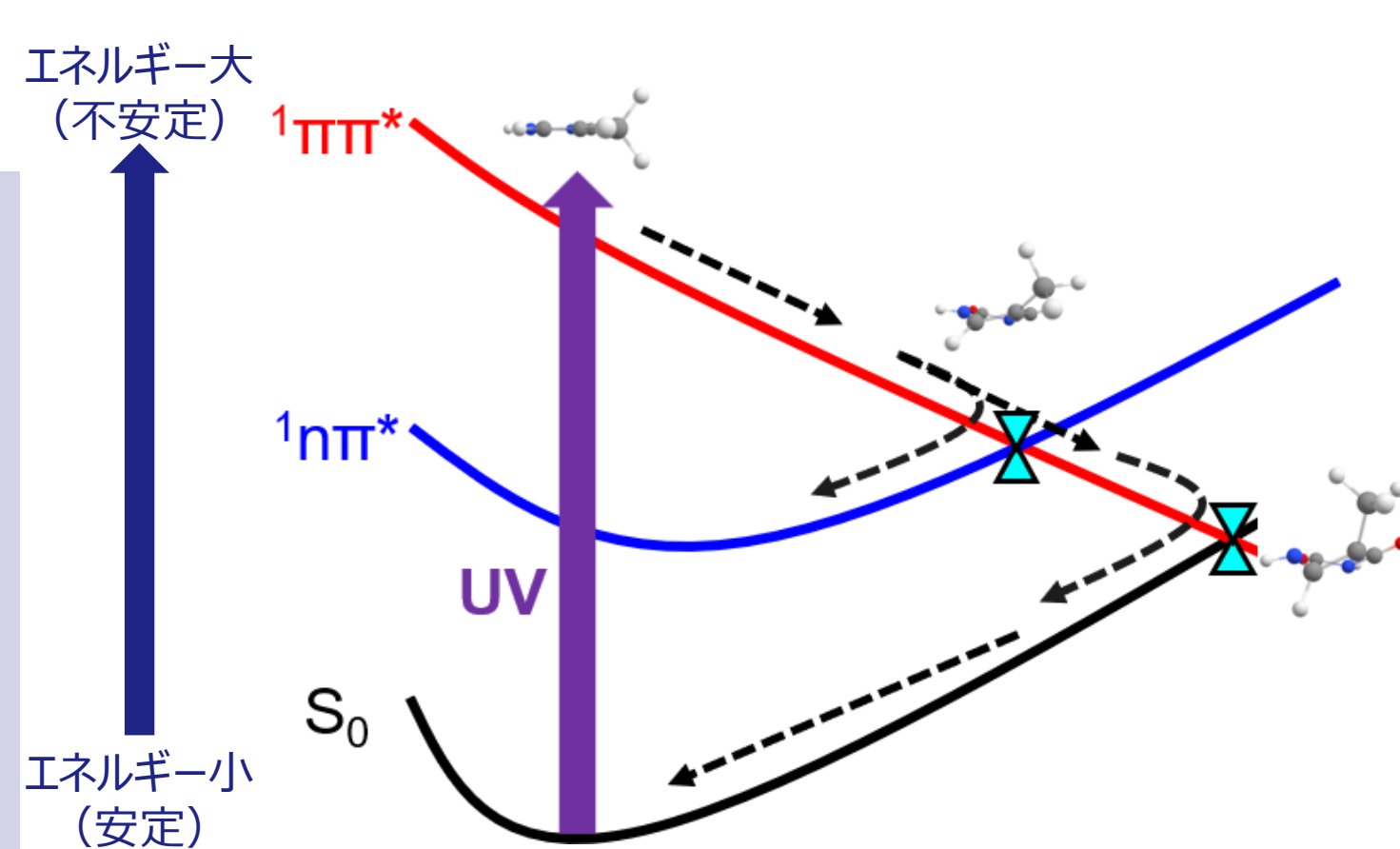


コンピュータシミュレーションでDNA 内部の核酸塩基に紫外線を照射し、核酸塩基分子のシュレーディンガー方程式を解く。

紫外線を吸収した核酸塩基は、**不安定な $1\pi\pi^*$ 状態**に遷移後、分子ねじれの熱運動により**安定な S_0 状態**に高速に戻るという失活ダイナミクスが解明されました。しかし近年実験的に、失活途中の別の状態である **$1n\pi^*$ 状態が重要**であることがわかるなど、いまだに解明されていない部分もあります。



ねじれの熱運動により失活することが判明！



4. 今後の展望

- ・ 失活ダイナミクスの全貌の解明
- ・ ダイナミクスの知見をがん研究に応用