

平成22年1月8日

機能材料工学専攻	学籍番号	043720
申請者 氏名	塚本 貴志	

指導 教員	栗田 典之 関野 秀男
----------	----------------

## 論文要旨 (博士)

論文題目	第一原理分子シミュレーションによる DNA 及び人工核酸の電気伝導特性の解析
------	--

(要旨 1,200 字程度)

DNA 二重鎖中の電荷が長距離移動できることが示されてから、DNA 二重鎖を次世代の電子デバイスとして利用することが提案されてきた。しかし、DNA 二重鎖の電気伝導特性は、塩基配列、溶媒、電極の構造や接続様式などに大きく影響されるため、実験毎に異なる特性が報告されてきた。その結果、DNA 二重鎖が絶縁体なのか導電体なのかさえはっきりとした結論は得られておらず、DNA 二重鎖を電子素子として応用する際のボトルネックとなっている。本研究では、密度汎関数法及び量子輸送理論に基づく高精度分子シミュレーションにより、DNA 二重鎖の電気伝導特性における塩基配列、溶媒、電極の構造や接続様式などの影響を、原子・電子レベルで解析した。さらに、DNA 二重鎖の電気伝導特性を向上させる目的で、新規の人工核酸塩基を設計し、その塩基を含む DNA 二重鎖の電気素子としての可能性について検討した。これらの結果は、今後、DNA 二重鎖をナノデバイスの基盤材料として応用する際に有益な情報となると考える。

本研究では、既存の電気伝導特性解析プログラムを改良することで、密度汎関数法に基づいて電子状態を高精度に決定し、量子輸送理論に基づいた電気伝導特性を解析する手法を開発した。さらに、開発した手法では電流電圧曲線を計算できるため、DNA 二重鎖の電気伝導特性について、実験と比較可能な結果を得ることができる。また、電流電圧曲線のように実験と比較できる値が得られるだけでなく、電荷の透過関数や分子軌道 (MO) のエネルギー分布など、実験では得られない電子レベルまで掘り下げた結果を得ることができる。これにより、DNA 二重鎖の電気伝導特性における環境要因依存の原因について電子レベルで説明することが可能になった。

本研究では、まず、既存の電気伝導特性解析プログラムを用いて、様々な環境要因を持つ DNA 二重鎖の電気伝導特性を網羅的に解析し、電極の熟慮と高精度分子軌道法の必要を明らかにした。次に、本研究で開発した手法を用い、密度汎関数法に基づいて DNA 二重鎖の電気伝導特性を高精度に解析し、塩基配列と DNA 周囲の水和水が電気伝導度に与える影響について実験と定性的に一致する結果を得た。その結果、電気伝導特性における塩基配列依存は各塩基の MO のエネルギーレベルの違いによって起こること、水和による電気伝導特性の変化は DNA 周囲の水和水による DNA 二重鎖の MO のエネルギーシフトによって起こることを明らかにした。本研究は、これまで未解明とされてきた DNA 二重鎖の電気伝導特性の一部を明らかにするものであり、DNA 二重鎖の電気素子としての応用に寄与できるものであると考えている。さらに、既存の人工核酸塩基を含む DNA 二重鎖の電気伝導特性を解析することで、既存の人工核酸塩基が電気伝導特性に優れる理由を明らかにし、より電気伝導特性に優れた新規人工核酸塩基を提案し、それらの新規人工核酸塩基を含む DNA 二重鎖の電気伝導特性を明らかにした。