

グラファイト破壊および膜孔を通過する DNA の物質科学

田中基彦 (核融合科学研究所)

この講演では、物質科学の視点から私のグループで進めている、グラファイト破壊と炭化水素分子生成の第一原理 (量子力学) 分子動力学、および生物物理の一端である膜孔を通過する DNA の (古典) 分子動力学の研究についてお話したい。数値シミュレーションは実験と理論を補完する研究手法であり、数値実験とも呼ばれており、原子過程を扱う分子動力学法にも大きく分けて、古典的 (ニュートン力学) 方法と量子力学的方法がある。

グラファイトは炭素原子の多層結晶であり、水素吸着によるその破壊過程では電子分布が大きくゆがむため、量子力学的な計算手法が必要となる。ここでは、密度汎関数法に基づく原子基底の第一原理分子動力学法を用いて計算を進めた。主な結果は、水素吸着によりグラファイトの炭素原子が平面から波打ち、一部の C-C 結合が切れて水素原子との C-H 結合が生じる。本来グラファイトの炭素が 2 個の水素を吸着して C-H₂-C 結合を作るためには数 eV のエネルギーバリアーを超える必要があるが、水素吸着によるグラファイトの変形はこのバリアーを下げる効果がある [1]。

膜孔を通過する DNA は、核膜を通過する DNA や、DNA の分子量定量法として実験研究が進められている。ここで特徴的であるのは、(分子) 膜は油性であり低誘電率の物質であり、一方細胞液は高誘電率をもつ。このため孔を含め膜では静電エネルギーが誘電率に反比例して濃縮され、運動や構造形成に大きく寄与するはずである。実際、生体现象でも静電効果が重要であり、膜孔では裸のイオンが存在しないこと、通過する DNA は対イオンの凝縮により完全に中和されることが、古典分子動力学により示された [2]。

参考資料

研究情報の全般は、ホームページ <http://dphysique.nifs.ac.jp/> を参照。

- [1] T.Koga and M.Tanaka, 5th Assembly of Asia Plasma and Fusion Association (Korea, 2005); submitted to Korean J. of Physics.
- [2] Y.Rabin and M.Tanaka, Phys.Rev.Lett., vol.94, 148103 (2005).