

## 基準振動モードの粗視化を応用したヌクレオチド鎖のモデル構築

(東大生研<sup>1</sup>, 東大環安セ<sup>2</sup>) ○岡村 彰太<sup>1</sup>・北條 博彦<sup>1,2</sup>

Building a model of nucleotide chains by applying coarse-graining of the normal modes of vibration (<sup>1</sup>*Inst. Ind. Sci., Univ. Tokyo*, <sup>2</sup>*Env. Sci. Ctr., Univ. Tokyo*) ○Shota Okamura,<sup>1</sup> Hirohiko Houjou<sup>1,2</sup>

To calculate vibrational frequencies with low cost and high accuracy, we have been developing a coarse-graining method by reducing the dimension of the atomic displacement vectors of the normal mode vibrations. This method was demonstrated applicable to many hydrogen-bonded dimers, including nucleobase pairs. In this study, we attempt to extend the method to nucleoside and nucleotide pairs and to determine the coarse-grained stiffness constants applicable to nucleotide chains. Using quantum chemical calculations, the structures of dA-dT and dG-dC pairs were optimized, which was provided for normal mode analysis. The normal coordinates and frequencies were analyzed, to afford the stiffness constants corresponding to the shear, stretch, stagger, propeller, open, and buckle displacements caused by the relative translations and librations of the constituent molecules. Quantum chemical calculations and coarse-graining analysis were performed using Gaussian16 and a program under development in our laboratory, respectively. We will discuss a comparison of the coarse-grained stiffness constants between base pairs and their decomposition into contributions from the sugar phosphate and the base moieties. Next, we will formulate a scheme for calculating the interaction term between the base pairs, which is a necessary step for applying it to oligonucleotides.

**Keywords :** *coarse-graining; nucleotide; normal mode vibration*

我々はこれまでに、基準振動における原子変位ベクトルの次元を縮約することにより、低計算機負荷かつ高精度で振動数を計算するための粗視化方法を開発してきた。この方法は核酸塩基対を含む多数の水素結合性二量体に適用可能であることがわかっていて、本研究では、この手法をヌクレオシド対、ヌクレオチド対へと拡張し、ヌクレオチド鎖の計算に適用可能な粗視化剛性定数の決定を試みた。

量子化学計算により dA-dT 対, dG-dC 対を構造最適化し、次いで基準振動解析を行った。得られた基準座標と振動数を解析することにより、構成分子の相対的な並進・回転で生じる shear, stretch, stagger, propeller, open, buckle の各変位に対応する剛性定数を求めた。量子化学計算には Gaussian16 を、粗視化剛性定数の算出には研究室で開発中のプログラムを用いた。発表では塩基対間における粗視化剛性定数の比較について述べ、糖リン酸エステル部位に固有の因子と、塩基に依存する因子への分割を試みる。これらの解析結果に基づき、系をさらにオリゴヌクレオチドへと拡張した際に考慮すべき、塩基対間の相互作用項を算出するための定式化を試みる。

