

塩基対モデルにおける二重プロトン移動による GC 塩基対から AT 塩基対への変異の量子化学的研究

(国士舘大理工) ○小田井 圭・梅崎 馨章

A quantum chemical study of mutation from GC base pair to AT base pair by double proton transfer in base pair model

(Department of Electronics and Informatics, Kokushikan Univ.) ○Kei Odai, Keisho Umesaki

DNA forms a double helix structure by hydrogen bonding of four bases : guanine (G), cytosine (C), adenine (A), and thymine (T). About 60 years ago, Lowdin proposed the hypothesis that a double proton transfer at the hydrogen bond formed between G and C would cause a mutation to A: T base pairs. We examined the ratio of mutation $G-C \rightarrow A-T$ occurred based on quantum chemical calculations and reaction kinetics. The reaction coordinates (IRC) for double proton transfer were calculated. The reaction rate constant was determined based on the IRCs, and the concentration of the mutated product was determined.

Keywords : Double Proton Transfer, Watson-Crick Base Pair, Density Functional Theory, Intrinsic Reaction Coordinate

DNA はグアニン(G)、シトシン(C)、アデニン(A)、チミン(T)の4つの塩基により二重らせん構造を形成している。60年ほど前に Per-Olov Löwdin は G と C の間に形成された水素結合において二重プロトン移動が起こると、DNA の複製を重ねることで A-T 塩基対へと変異を起こすという仮説を提唱した¹⁾。我々は、この二重プロトン移動により変異が生じる可能性を量子化学計算と反応速度論に基づいて検証している。Fig 1.のように G-C から A-T へ変異する過程で、二重プロトン移動に対する反応座標 (IRC) を B3LYP/6-311++g(d,p)レベルで計算した。その IRC に基づいて反応速度定数を決め、生成物である G*-C*や G*-T*などの存在確率を求めた。最終的に G-C から A-T への変異の確率を求めたので報告する²⁾。

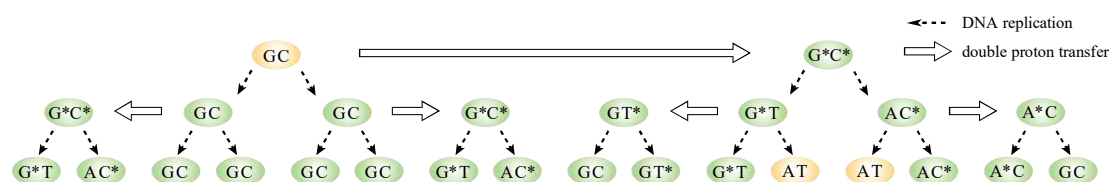


Fig 1. Watson-Crick like base pairs appearing within replicating twice from a G-C base pair by double proton transfers.

1) Löwdin, P. O. Proton tunneling in DNA and its biological implications. *Rev. Mod. Phys.* **1963**, 35, 724-732.

2) Odai, K.; Umesaki, K., A Kinetic Study of Transition Mutation from G-C Base Pair to A-T Base Pair in Watson-Crick DNA Base Pairs: From a Point of View of Double Proton Transfers. *J. Phys. Chem. A*, **2021**, 125, 8196-8204.