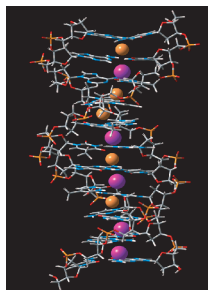


金属を含むDNA

- ドラッグデザインやナノマテリアルへの応用

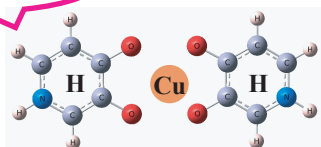


- 電子状態が複雑 → 理論化学の興味の対象
- 近年、人工DNAが注目されている



人工DNA: 金属を含むDNA類似物

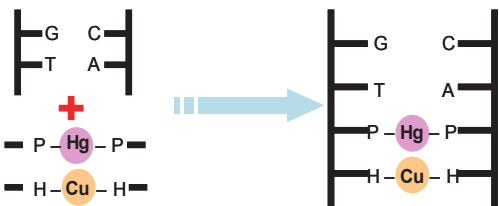
Cu_HH型



Hg_PP型



- 自己集合によりDNAへの挿入可能

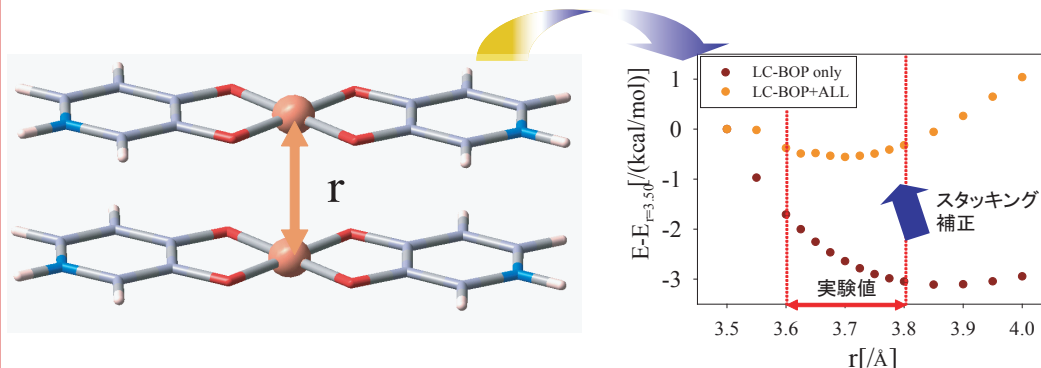


- 電気伝導性DNAへの応用に期待

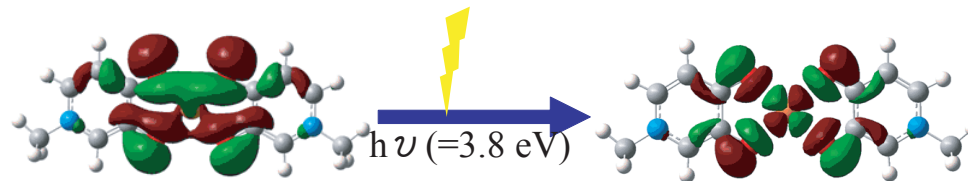
本研究の目的: 人工DNAの物性を計算によって明らかにする

現在、理論化学で可能なことは...

- 最安定構造でのCu-Cu間の距離を計算
- 安定化エネルギーを導出



- 吸収波長ピークにおける励起状態を特定



今後の方針

- Hg-Hg間の距離を計算 (相対論効果)
- 電気伝導度などの物性を計算
- 自己集合のメカニズムを計算で追う