

DNA 分子を固定化した半導体/バイオインターフェイス構造の 分子動力学法による解明

Elucidation on DNA-modified semiconductor / bio-interface structure with
classical molecular dynamics simulation

東京大学工学系研究科

前川侑毅、澁田靖、加治佐平、坂田利弥

School of Engineering, Univ. of Tokyo

Yuki Maekawa, Shibuta Yasushi, Taira Kajisa, Toshiya Sakata

sakata@biofet.t.u-tokyo.ac.jp

【はじめに】近年、様々な種類のバイオセンサーが研究・開発され、医学生物学分野で実際に使用されている。ほぼ全てのバイオセンサーは固相と液相と生体分子からなるバイオインターフェイスを有している。半導体原理に基づく電界効果トランジスタ(Field Effect Transistor; FET)を用いたバイオセンサーは、種々の検出手法によるバイオセンサーの中で生体分子固有の電荷を直接計測できる特長を有する。FET バイオセンサーの基本的な原理は、生体分子認識反応に基づく電荷密度変化として検出するものである。バイオセンサーの中でも、FET バイオセンサーはその動作原理上バイオインターフェイスの構造の理解が必要不可欠であるが、実験の困難さから研究が進んでいないのが実情である。そこで本研究では、複雑な固液界面構造を明らかにするため、古典分子動力学法(Molecular Dynamics; MD)によるシミュレーションにより、バイオインターフェイス構造の総合的な考察を目的とする。本発表では固相として SiO_2 、液相として NaCl 水溶液、生体分子として DNA を選択し、コンピュータ上でバイオインターフェイス構造を構築した。またそのバイオインターフェイス構造モデルに対して古典 MD によりダイナミクスの解析や、固液界面のみのモデルの計算結果と比較することで、生体分子の有無が電気二重層構造に与える影響を調査した。

【シミュレーション】バイオインターフェイスモデルと固液界面モデルの電気二重層構造を比較するために 2 つのシミュレーションセルを作成した。固液界面モデルは酸化物表面として (100) SiO_2 スラブを選択し、1.0 mol/l 塩化ナトリウム水溶液のセルと結合させた。バイオインターフェイスモデルは SiO_2 に 10mer の polyAT からなる二重螺旋構造の B-DNA を DNA リンカーを用いて固定し、固液界面モデルと同じ濃度、セルサイズになるように周囲に NaCl 水溶液を配置した。構造安定化を行った後、系の平衡化として 100K、200K、300K で 0.5ns の分子動力学計算を実行した。本計算は NVT アンサンブルで温度 300K の条件のもと 3.0ns 実行し、最終 0.5ns を解析に使用した。全ての計算は分子動力学計算ソフトウェア Materials Studio [1]上で実行し、力場は COMPASS [2,3]を使用した。

【結果】DNA 分子の有無で界面近傍の電気二重層構造に大きな変化は認められなかった。これは高イオン濃度下では DNA 分子の電荷はセンサ表面近傍のポテンシャル変化にほとんど影響を及ぼさないことを示唆する。界面近傍の電荷およびポテンシャル分布など詳細については当日発表する予定である。

【参考】[1] Accelrys Materials Studio 6.1, Accelrys Software, Inc.: San Diego, 2012

[2] H. Sun: J. Phys. Chem. B 102 (1998) 7338.

[3] H. Sun *et al.*: Spectrochim. Acta. Part A 53 (1997) 1301.