Na⁺と Mg²⁺の混合水溶液における DNA 界面のイオン構造

Ionic structure around DNA duplex in Na⁺ and Mg²⁺ solution with molecular dynamics simulation

東京大学大学院工学系研究科

前川侑毅、澁田靖、坂田利弥

School of Engineering, Univ. of Tokyo

Yuki Maekawa, Yasushi Shibuta, Toshiya Sakata

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

【はじめに】近年、バイオセンサの医学生物学分野での利用、応用が盛んになっている。特に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は、種々の検出手法によるバイオセンサ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 バイオセンサは、絶縁膜上に固定された生体分子の電荷変化に由来するドレイン電流の変化を計測することにより、生体分子における種々の反応を検出するものである。FET バイオセンサは電荷を計測するという動作原理上、界面構造の理解が必要不可欠である。我々のグループでは古典分子動力学法により、固液界面および酸化物表面に DNA を固定した半導体/バイオインターフェイス界面における電気二重層構造について研究を行ってきた[1,2]。その結果から、生体分子周囲の溶液雰囲気は FET バイオセンサの計測原理に極めて重要であるという知見[3]を得た。そのため、前回の発表では、古典分子動力学法を用いて Na⁺のみが存在する水溶液下での B-DNA 周囲の水分子やイオン構造について詳細を示した。しかしながら、実際は DNA の計測において一種類のイオンのみが存在するような環境は想定しづらく、特に Mg²⁺は DNA の様々な反応に不可欠なイオンである。従って、本発表では、Na⁺と Mg²⁺の両方が混合した水溶液における DNA 周囲のイオン構造について検討を行った。

【計算条件】直方体セルの中央に二重螺旋構造を持つ Adenine と Thymine からなる 10mer の B-DNA を配置し、周囲を水分子と 20 個の Na⁺と 9 個の Mg²⁺、および 18 個の Cl⁻により充填した。このとき水溶液濃度は Cl⁻濃度換算で 180 mM である。また比較検討のために周囲を 19 個の Mg²⁺と 18 個の Cl⁻で充填した同様の直方体セルを用意した。DNA のセル上部の 5'末端とセル下部の 3'末端を周期的境界条件により共有結合させ、DNA は無限遠長を持つと仮定できるものとした。最急降下法と共役勾配法による系の平衡化の後、NVT アンサンブルにより 300K で 10.0 ns の分子動力学計算を行い、最終 2.0 ns 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 上で実行し、力場は COMPASS II を使用した。

【結果】Na⁺のみの場合では 2 層の層構造が形成されていることを報告したが、Mg²⁺が混合した水溶液では 3 層の層構造が形成された。結果の考察やその他の解析結果などの詳細については当日発表する。

【参考文献】

[1] Y. Maekawa *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. 52 (2013) 127001. [2] Y. Maekawa *et al.*, ChemElectroChem 1 (2014) 1516. [3] Y. Maekawa *et al.*, Chem. Phys. Lett. 619 (2015) 152.