

分子動力学法に基づく double-stranded DNA 界面の水とイオン挙動

Water and ion behavior around double-stranded DNA in classical molecular dynamics simulation

東京大学大学院工学系研究科

前川侑毅、澁田靖、加治佐平、坂田利弥

School of Engineering, Univ. of Tokyo

Yuki Maekawa, Yasushi Shibuta, Taira Kajisa, 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 バイオセンサの基本的な原理は、絶縁膜上に固定された生体分子の電荷と半導体中の電子との静電的相互作用によるソース-ドレイン電流の変化を計測することにより、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。バイオセンサの中でも、FET バイオセンサはその動作原理上、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]。その結果として、ターゲットとなる生体分子周囲の溶液雰囲気半導体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を得た[3]。従って、本研究では準希薄溶液環境下において二重螺旋構造を持つ DNA 周囲の水分子やイオンの動的・静的な構造について古典分子動力学法を用いて詳細に調査した。

【計算条件】立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 29 個の Na^+ と 9 個の Cl^- により充填した。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 10.0ns の分子動力学計算を行い、最終 2.0ns 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】DNA のリン酸基周囲に水和により水分子の三次元的殻構造が形成されていることが分かった。また水分子の分布は DNA の持つ対称性と同等の対称性を有することが確認された。一方、 Na^+ はリン酸基の負電荷の影響から DNA 周囲に集積するが、濃厚溶液の場合よりも配位数が減少していることが明らかとなった。このことから、希薄溶液下では DNA 由来の負電荷を遮蔽する効果が濃厚溶液の場合と比較して小さくなっているものと考えられる。DNA 周囲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。

【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.