

生体材料として機能する DNA-SWCNTs 複合体の振動ダイナミクス

Oscillation Dynamics of DNA-SWCNTs composites functioning as a biomaterial

東理大理¹, (株) エステック², 北教大教³ ○(D)宮代 大輔^{1,2}, (P)平 久夫³, (P)梅村 和夫¹

Tokyo Univ. of Sci.¹, ESTECH Corp.², Hokkaido Univ. of Edu.³,

°Daisuke Miyashiro^{1,2}, Hisao Taira³, Kazuo Umemura¹

E-mail: daisuke.miyashiro@estech.co.jp

単層カーボンナノチューブ (SWCNTs) は優れた機械的・光学的特性を有しており、一本鎖 DNA(ssDNA)の様な有機物で表面を被覆すると親水性を持つ生体材料として応用できることが知られている。一方、生体材料として体内に適用するとき細胞を傷つけない SWCNTs の長さは 100 ~200nm という報告[1]があるが、ssDNA-SWCNTs と細胞間にどのような相互作用が生じるかは不明な点が多い。この ssDNA-SWCNTs 複合体 1 本と細胞間の振動特性を実験的に評価するのは困難でありシミュレーションによる検討が有効である。これら複合体の挙動を計算する手法として分子動力学法(MD)計算があるが、100nm を超える長さの ssDNA-SWCNTs や細胞との振動特性を MD 計算で評価することは多大な時間を有し現実的ではない。そこで、有限要素法(FEM)を用いて生体内を模擬した状態における ssDNA-SWCNTs 複合体の振動特性を研究する。

有限要素モデル (FE モデル) は SWCNTs を円筒の SHELL 要素とし、その周りに SOLID 要素で作成した ssDNA を線形バネで吸着させた。ssDNA や SWCNTs の材料特性は先行研究[2]の値を使用した。ssDNA-SWCNTs の固有モードや周波数応答解析は、自由支持に加えて剛壁と弾性壁で支持した片持ち梁状態、両端支持状態で計算した (図 1)。また有限要素法の計算プログラムは汎用構造解析ソルバ MSC.Nastran を使用した。

開発した SWCNTs の FE モデルは自由端や剛壁で支持した片持ち支持、両端支持状態で固有値計算を行いモデルの妥当性を検証した (図 2)。FEM で計算した SWCNTs の曲げ固有値は弾性曲線方程式による計算結果と比べ誤差 3%以内の精度で一致した。次に、片持ち梁状態における ssDNA-SWCNTs 複合体の FE モデルを用いて周波数応答解析を行い振動特性を計算した。その結果、剛壁支持と比べ細胞壁を模擬した弾性壁支持では SWCNTs 曲げ振動の固有値低下に伴い単位力当りの振動振幅が 10 倍以上大きくなる予測結果を得た。FEM を用いることで、従来の実験や MD 計算で予測困難な ssDNA-SWCNTs と細胞間の振動特性を明らかにしたので報告する。

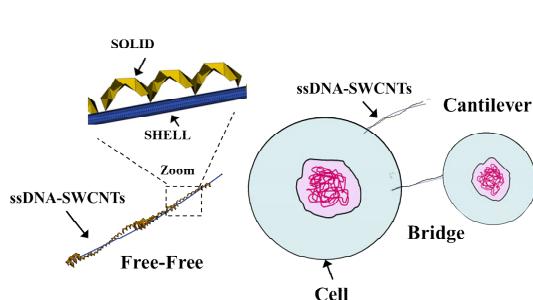


Fig.1 Boundary conditions assuming in vivo

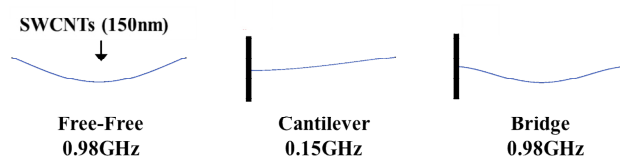


Fig.2 1st-bending mode of SWCNTs

[1] Kang B, et.al, Small 2010; 6, 21: 2362-2366.

[2] Miyashiro D, et al., Compos. Part B 2019,173, 106896