

29amB-138

DNA – 低分子間相互作用解析のための実験条件の構築

○波多野 雄大¹, 権 娟大¹, 宮崎 智¹(¹東京理大薬)

【目的】分子動力学法(MD)法は、ニュートンの運動方程式を構成原子全てに対して解くことで、分子間相互作用を動的に解析する方法である。現在、MD法による解析の対象は、主にタンパク質であり、DNAを対象とする解析は難しいとされてきた。これは、DNAが負の電荷を持つために、解析の途中でらせん構造が破壊されてしまうからである。そこで本研究では、静電相互作用の計算方法の違いによる解析を行い、どの計算方法がDNA分子のシミュレーションを実現する条件なのか決定することを目的とする。また、その条件を用いて、PDBから取得した立体構造ファイルを動的解析し、結合エネルギーを算出することを目的とする。

【方法】まず、塩基数6のDNAを作成し、その周囲に水分子を配置させて基本セルとした。配置の方法は、球状に配置する方法(Water Cap)と基本セルと同じ構成のイメージセルを繰り返し配置する周期境界条件が考慮できるよう直方体状に配置した2種類を用意した。次に、作成した基本セルについて動的解析を行った。この際、原子間の距離が閾値を超えた場合に相互作用を切り捨てるCutoff法と周期境界条件によって繰り返し配置された、イメージセル中に存在する全ての粒子との相互作用を計算できるPME法の2種類を検討した。さらに、条件決定後取得した立体構造ファイルを動的解析し結合エネルギーを算出した。

【結果・考察】Water Capの場合、周期境界条件は考慮できないためPME法による計算はできない。そこで、水分子の配置方法と相互作用の計算方法から考えられる3条件で動的解析を行った。その結果、計算方法としてCutoff法を選択した場合、安定的な解析が可能になった。また、決定した条件下で結合エネルギーを算出したところ、妥当な値を算出することができた。