

## 05 DNA 二重らせん構造の分子動力学シミュレーション

---

DNA は塩基の並び方により構造が変化することが知られています。アデニン (A) が複数連続している” A-tract” と呼ばれる部位もその一つで、二重螺旋が特徴的に湾曲する構造であることが様々な実験により明らかにされています。

本研究では、中央に A-tract 構造をもつ 16 塩基対の DNA を理論的な原子配置をもつ塩基を並べて構築し、水溶液中でどのような構造に推移してゆくか、AMBER というプログラムを用いて 300[K] の定温、定圧力の条件で 1[ns] のシミュレーションを行いました。シミュレーション開始時は原子間に働く力で構造が様々な変化していますが、やがて湾曲があり、副溝と呼ばれる溝が狭くなった一定の構造に落ち着いてゆく様子が分かります。これは実験値と一致しています。