

吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討

Theoretical Studies on Microscopic Problems in Separation Engineering and Drying

京都大学 大学院 工学研究科 化学工学専攻 分離工学分野 鈴木哲夫

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、吸着工学、乾燥工学、食品工学などの種々のプロセスに関連する物理化学的な諸問題を取り上げ、分子軌道法や分子動力学法などの計算機科学的手法を用いて検討を行うことを目的としている。今年度は miRNA の水和状態、および miRNA 水溶液の凍結過程について、分子動力学(MD)計算により検討した。MD 計算に用いたソフトウェアは Amber22 である。以下その概要を報告する。

miRNA の例として、23 残基からなる has-miR-3691-5p mature miRNA をとりあげた。この miRNA 1 分子に対して、Na⁺イオン 22 個、水分子 6093 個配置したものを MD 計算の基本セルとした。この基本セルに3次元周期境界条件を適用し、1 bar、30 °C の NPT アンサンブル MD 計算を実行した。熱平衡後の基本セルのサイズは約 47Å×47Å×86Å だった。得られた計算結果から、30 °C の水中における 2 μs 間の miRNA の動的挙動を可視化ソフトウェア VMD を用いて調べた。その結果、miRNA は時間経過に伴い、伸び切った構造や両端が折り畳まれた構造など、様々な形状をとることが示された。

さらに詳細に検討したところ、300 ns や 500 ns において、miRNA は折れ曲がった構造をとっているが、その構造は通常(ワトソン-クリック型)の塩基対(A-U、G-C)でなく、通常とは異なる塩基対(U-G)間の水素結合により形成されていることがわかった。

次に、miRNA の凍結過程について検討するため、まず 3168 個の水分子からなる約 50Å×24Å×89Å の大きさの氷の結晶の分子モデルを作成した。この氷晶と上記の水溶液を MD 計算の基本セルに配置することで、凍結過程を検討するための基本セルを作成した。この基本セルに3次元周期境界条件を適用し、1 bar、-40 °C の NPT アンサンブル MD 計算を実行した。基本セルのサイズは約 50Å×70Å×89Å だった。時間が経つにつれて、氷晶が成長し、600 ns 程度経過すると、ほぼすべての水分子が氷晶を形成した。VMD による可視化により、miRNA 近傍のわずかな水分子以外は凍っていて、miRNA が氷の中に閉じ込められたことが確認できた。

この凍結過程に対し、miRNA と水や氷との水素結合数の経時変化について調べた。凍結が進むにつれ、miRNA-水間の水素結合は減少し、氷との水素結合は増加する。ほぼ全ての水分子が氷晶となった 600-610 ns において、miRNA-氷間の水素結合数は 241 本であった。一方、0-10 ns における系の状態は、氷晶があまり成長しておらず、miRNA-水間の水素結合数(273 本)とほぼ同程度である。これより、miRNA は氷晶中においても、水中と同様に、水分子と多数の水素結合を形成し得ることがわかった。