

## 【研究背景】

DNA などの高分子をサイズごとに分離する一般的な手法として、様々なゲル電気泳動法が用いられてきた。これは、ゲルが分子ふるいの役割を果たすことで、長さの異なる高分子の電気泳動での移動性が変化することを利用している。しかし、ゲル電気泳動法では高分子の長さが長くなるにつれて分離効率が低下したり、高速に分離させるために高電場を掛けると、温度制御が難しくなり DNA が変性するという問題がある。

一方、マイクロ総分析システム (micro total analysis systems:  $\mu$ -TAS) の開発に伴い、小型かつより高性能な分離デバイスが必要とされている。そこで開発されたのがマイクロチップ電気泳動法である。これは小型のチップ上に作成されたマイクロチャンネル中で高速電気泳動を行う方法である。このような DNA の高速な分離・解析を可能にしているのが、日本が得意とする微細加工技術を用いてチャンネル中に作成されている分離用ストラクチャーである。このストラクチャーも、nano-pillar、や nano-sphere を用いて作成されたものや entropic trap と呼ばれているものなど様々であるが、共にゲルやポリマー溶液などの媒体が必要ないため簡便に解析が行え、強い電場を掛けることができるため、巨大な高分子も高速に分離可能であることが利点である。

## 【計算方法】

本研究では、この中で、ナノピラーを用いた分離用ストラクチャーを模したものを作成し、ランジュバン方程式に基づいたブラウニアン動力学法を用いて、拡散のシミュレーションを行い、分離実験を検証する。

まず、この分離シミュレーションを簡潔に表現するため、次のような実験モデルを作成した。重合度の異なる高分子は、つなぐビーズ A の個数を変化させてモデル化する。また、ピラーは図 1 のようにモデル化を行った。なお、高分子のモデルとピラーのモデルの間には Lennard-Jones (LJ) ポテンシャルによる相互作用が働くものとする。電場によって分子を移動させる電気泳動を擬似的に表現するため、一定方向に外力をかけることで高分子がナノピラー中を移動するようにする。このようにモデル化したものを、周期的境界条件を課した単位セル内に、図 2 のように配列し、その中に適当な大きさの高分子を配置して、シミュレーションを開始する。このシミュレーションから得られた座標データを用いて、平均移動距離を求める。それを、配置する高分子の長さ、ナノピラーのサイズ、およびピラー間の間隔や配列、付加する外場の強さを変化させて行う。また、それが、高分子の長さ、付加する外力の変化によってどう変化するかを調べる。

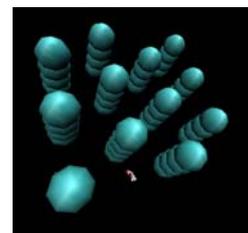


図 1:モデル化した  
ナノピラー

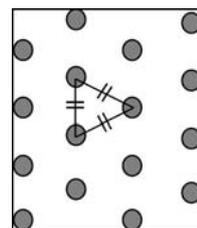


図 2:ピラーを  
配置したセル

[1] M. Germana Paterlini, David M. Ferguson, Chem. Phys. 236, 243 (1998).

[2] W.F. van Gunsteren, H.J.C. Berendsen, Molec. Phys. 45, 637 (1982).

[3] 堀池靖浩・片岡一則著 「バイオナノテクノロジー」 オーム社 110 (2003)