

Molecular Dynamics Simulation for Evaluation of Effect of DNA by
Tritium beta-decay

中村 浩章^{1,2)}, 石黒 健人²⁾, 藤原 進³⁾, 齋藤 誠紀⁴⁾, 波多野雄治⁵⁾
NAKAMURA Hiroaki^{1,2)}, ISHIGUTO Kento²⁾, FUJIWARA Susumu³⁾, SAITO Seiki⁴⁾,
HATANO Yuji⁵⁾

¹⁾核融合研、²⁾名大、³⁾京都工繊大、⁴⁾山形大、⁵⁾富山大

¹⁾NIFS、²⁾Nagoya Univ.、³⁾Kyoto Inst. Tech.、⁴⁾Yamagata Univ. ⁵⁾Toyama Univ.

1. 研究目的

核融合の生成物・燃料であるトリチウムの生体分子への影響を、分子動力学法を使って、原子レベルから定量的な評価を行うことを目的とする。いわゆる放射物質の生体への影響は直接・間接作用、そして、壊変効果が知られている[1]。本研究では、壊変効果をターゲットとする。さらに、生体高分子としてDNAのテロメア構造を考え、DNA二重鎖切断頻度の評価を行う[2,3]。

2. シミュレーション手法・モデル

分子シミュレーションには、MDコードには、Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) コードを用いる。力場として、CHARMM, ReaxFF[4]を用いる。具体的なシミュレーションモデルとして図1のように、配置する。

3. 結果

図2のように、DNAの平衡状態を得ることができた。図2左図は、水分子を見えないようにした状態でのDNAの構造である。右図は、DNAの主鎖のみの構造を図示している。

定常状態を得ることができた。ただし、今回選んだDNAは短いため、端の方から、共有結合が離れていく様子が見えている。

この構造にβ崩壊による壊変を、人工的に加えて、その位置・数による二重鎖切断の有無などを報告したい。

謝辞

科研費19K03800, 21K19845 and 22K03572、
NIFS共同研究NIFS22KIIP003 and NIFS22KISS021
のサポートを受けた。分子研計算機センター
(Project: 22-IMS-C117) さらにNIFSプラズマ
シミュレータを使った。

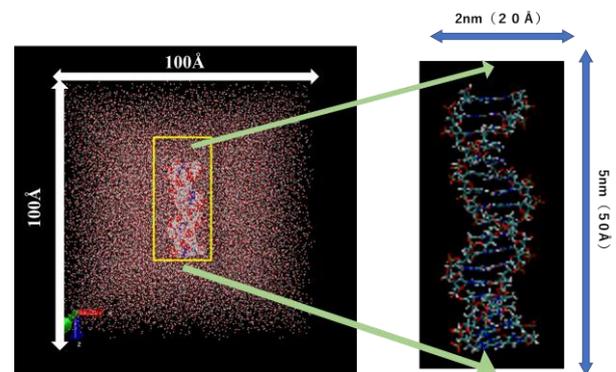


図1. DNA と溶媒 (水) のモデル。

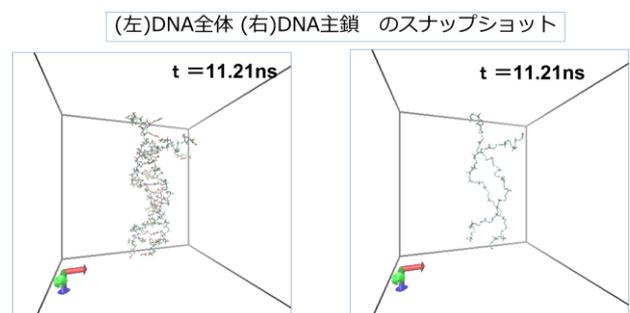


図2. 平衡状態での DNA の構造
(左) DNA 全体構造、(右) DNA 主鎖の形

参考文献

- [1] Yuji Hatano, et al., Fusion Engineering and Design, 146 (2019) 100.
- [2] Hiroaki Nakamura, et al., Japanese Journal of Applied Physics, 59 (2021) SAAE01.
- [3] Seiki Saito, et al., Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering, 8 (2021) 173.
- [4] Monti, Susanna et al., Phys. Chem. Chem. Phys., Vol. 15 (2013) 15062.