

조 수 진 성균관대학교 기계공학부 박사과정 | e-mail : jsj89@skku.edu

김 문 기 성균관대학교 기계공학부 교수 | e-mail : mkkim@me.skku.ac.kr

이 글에서는 DNA 염기서열의 자가조립 현상을 활용한 다양한 나노구조물의 설계 및 합성 사례를 소개하고 합성된 나노구조물의 동특성을 탄성네트워크모델(Elastic Network Model, 이하 ENM) 기법을 통해 해석해 봄으로써 향후 DNA 기반 나노구조물 합성 및 응용연구의 기반 기술을 제시하고자 한다.

DNA 구조는 염기서열이 가지고 있는 상보성 때문에 다양한 형태의 구조물들을 설계하고 제작하는 것이 매우 용이하다. 최근 많은 과학자들이 DNA로 다양한 나노구조물들을 합성하고, 그 구조물들을 다양한 산업 분야에 응용하기 위한 연구를 활발히 진행하는 것도 이러한 DNA의 고유특성 때문이다. 하지만 합성된 DNA 구조물을 공학적으로 이용하기 위해서는 구조적 안정성 뿐만 아니라 구조 고유의 진동 특성을 분석하는 것이 중요하다. 예를 들어, 교량과 같은 거대한 구조물을 설계할 때도 외부요인과 공명하여 붕괴하는 것을 막기 위해 구조의 고유 진동특성을 파악하듯이 나노단위의 작은 구조물을 설계할 때도 이러한 진동특성 분석이 필수적이다. 이에 ENM 기반 정규모드 분석을 통해 DNA 나노구조물의 동특성 DB를 보다 효과적으로 구축할 수 있고, 이러한 진동특성 기초자료는 향후 기능성 DNA 나노구조물을 설계하고, 합성하는 데 중요한 참고자료가 될 것이다.

### 탄성네트워크모델을 이용한 DNA 나노구조물의 진동특성 분석

ENM은 단백질이나 DNA와 같은 고분자 생체 구조체

의 동특성을 분석하는데 주로 활용되는 모델로서 기존의 분자동역학 시뮬레이션 기법에 비해 구성방정식이 단순하기 때문에 계산량은 적은 반면 상대적으로 큰 구조적 변화를 비교적 정확하게 예측할 수 있다는 장점이 있다. 하지만 ENM에서는 생체 구조를 구성하는 단위 분자구조인 핵산과 아미노산을 단위 질량을 가진 하나의 질점으로 가정하고, 이들 사이의 결합정보를 단일 스프링 상수로 모사하기 때문에 종종 부정확하거나 제한된 해석 결과를 얻기도 한다. 이러한 ENM의 단점을 보완하기 위해 개발된 모델이 질량 및 화학결합 효과를 고려한 탄성네트워크모델(Mass-weighted Chemical Elastic Network Model, 이하 MWCENM)이다. MWCENM은 실제 생체구조 내에 존재하는 다양한 질량 및 화학결합 정보를 반영하기 위해 핵산과 아미노산의 전체 질량을 대표 원자에 집중 질량으로 부여하고, 화학결합의 종류에 따라 서로 다른 스프링 상수를 부여한다. 이를 통해, 기존의 ENM과는 다르게 DNA 나노구조물의 고유모드 및 해당 고유주파수 정보도 동시에 획득 가능하다.

DNA 나노구조물은 특정한 서열로 프로그래밍된 구조물로서 1차 구조물부터 DNA 오리가미 구조물까지 다양한 종류가 존재한다. DNA 나노구조물을 합성하기

위해서는 제작하고자 하는 3차원 구조에 맞게 DNA 염기들의 상보성을 고려하여 단일 DNA 가닥의 염기서열을 설계하고 합성(PCR Amplification)한 후 어닐링 과정을 거쳐야 한다. 이러한 과정을 거치면 염기서열들의 선택적 자기조립 현상에 의해 만들하고자 하는 3차원 DNA 나노구조물을 합성할 수 있다. 이때, 3차원 나노구조물 합성에 반복적으로 사용되는(마치 건물의 기본 단위인 벽돌과 같은) 기본 DNA 유닛 구조를 통상적으로 DNA 타일로 부른다.

DNA 타일 구조 및 이를 통해 합성된 나노구조물의 동특성 파악이 중요한 이유는 DNA 나노구조물 설계 및 합성에 도움을 줄 뿐만 아니라 실제로 제작된 3차원 나노구조물의 응용에도 주된 참고자료가 되기 때문이다. 일례로, 그림 2에서 보는 바와 같이 십자가 형상의 평판 구조물인 DNA 타일을 자가조립을 통해 대량 합성하게 되면 면적이 넓은 평판 격자 구조물이 생성될 것이라는 일반적인 예측과는 달리 마치 탄소나노튜브와 유사한 3차원 나선형 구조물이 합성됨을 AFM 이미지를 통해 확인할 수 있다. DNA 기본 타일 구조를 ENM을 통해 모델링하고 그 동특성을 정규모드분석을 통해 예측해본 결과, 이는 자가조립 과정에서 고유 진동에 따른 타일의 굽힘 현상이 커져서 최종적으로

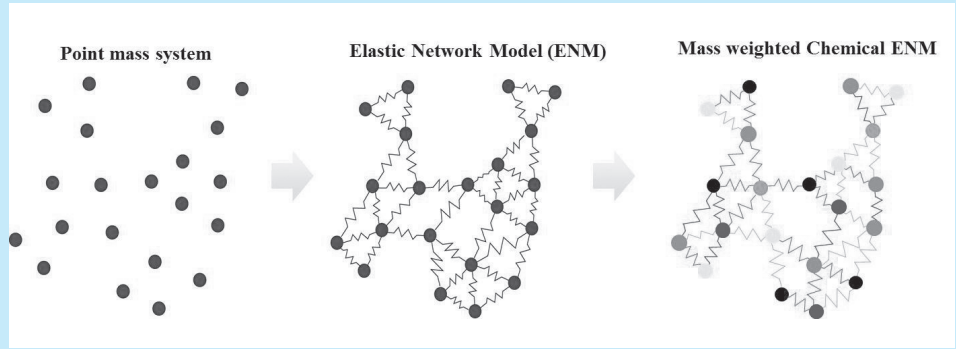


그림 1 MWCENM 개념도(Protein Science, Vol. 22, pp. 605).

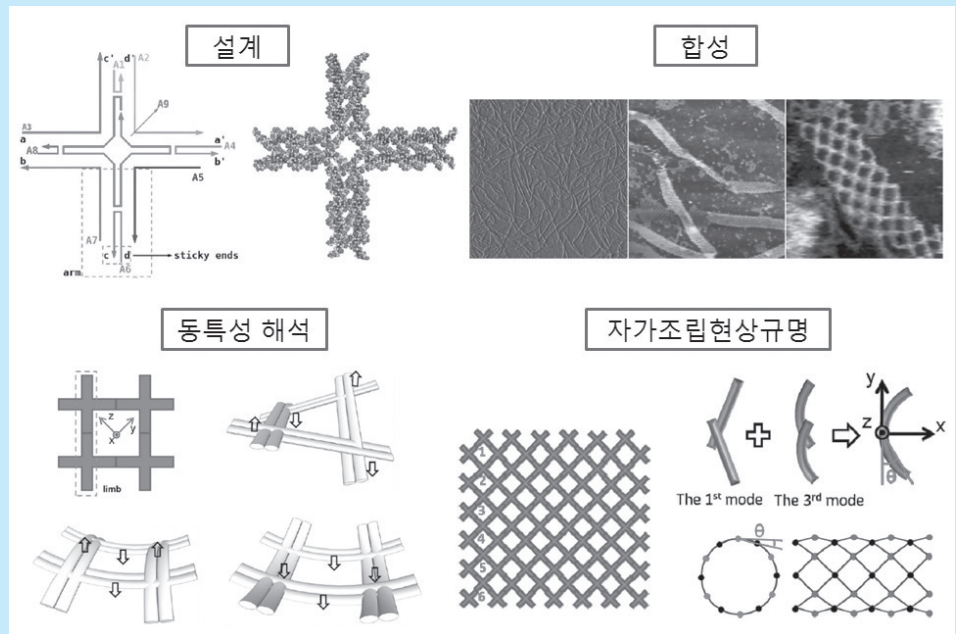


그림 2 DNA 나노구조물 설계, 합성, 및 동특성 분석 예시(Nanotechnology, Vol. 23, 105704).

로 3차원 나노튜브가 형성된 것임을 설명한 바 있다.

또 다른 사례연구로 DNA 헤어핀 구조를 들 수 있다. DNA 헤어핀 구조물은 double-crossover 구조(이하, DX 구조) 위에 헤어핀을 세운 구조물로서 DNA 자가조립 특성을 이용하여 헤어핀의 길이, 개수, 위치를 제어할 수 있다. 다양한 DNA 헤어핀 구조물의 진동 특성을 MWCENM을 통해 분석해 본 결과 헤어핀의 길이, 개수, 위치에 따라 주요 움직임이 달라지는 것을 확인할 수 있었다. 헤어핀의 길이가 길어짐에 따라 DX 구조와 헤어

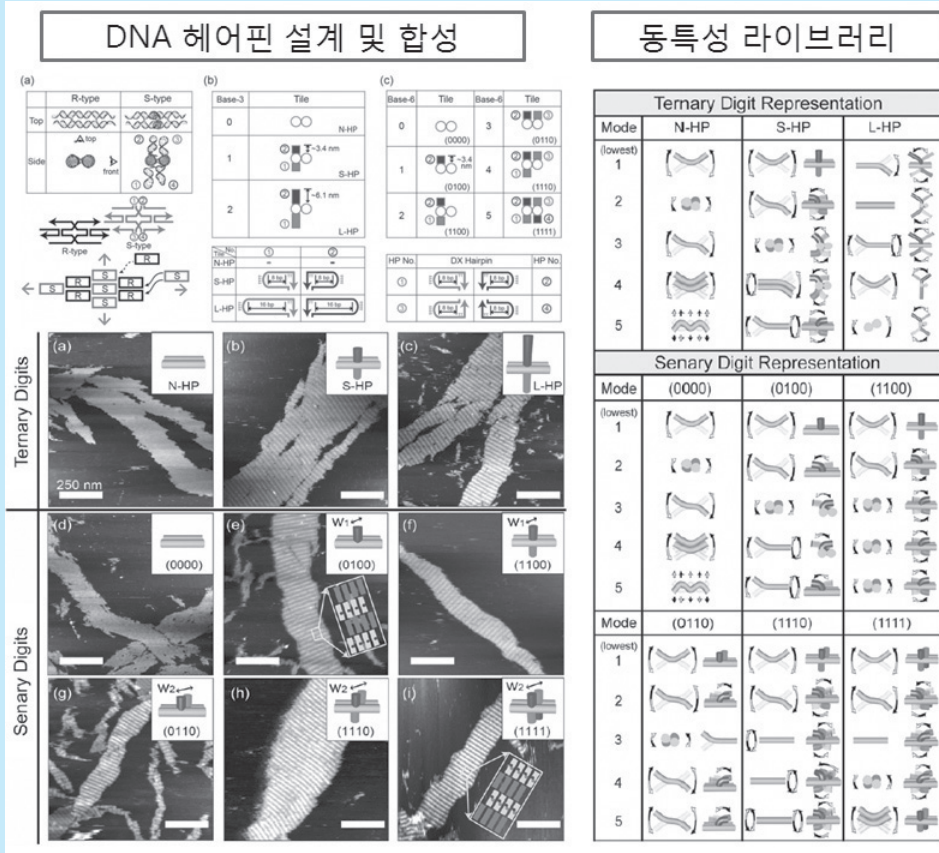


그림 3 DNA 헤어핀 구조 동특성 라이브러리 구축(Nanotechnology, Vol. 25, 105601).

핀 구조의 움직임이 유사해졌고, 헤어핀이 개수가 많아 질수록 DX 구조의 측면 굽힘 모드가 강조되었으며, 헤어핀의 위치에 따라 움직임의 대칭성과 비대칭성의 빈도수가 달라짐을 확인했다. 이러한 DNA 동특성 라이브러리의 가장 큰 장점은 DNA 구조를 설계하고 합성하는데 있어서 설계 최적화 및 실험 결과와의 상호 검증

것이다. 또한, DNA 기반 나노구조물 설계, 합성 및 응용 연구에 있어 전통적인 유전공학 합성기술뿐만 아니라 기계역학 해석 기술도 수반되어야 함은 앞으로 관련분야 연구에 관심이 있는 기계공학 전공자들에게 시사하는 바가 크다 할 수 있다.

위한 기초 자료로 사용될 수 있다는 것이다. 향후, 앞서 설명한 DNA 나노구조물 설계, 합성, 동특성 해석 기술을 바탕으로 헤어핀 부분을 특정 단백질과 결합할 수 있는 Aptamer로 대체한 맞춤형 바이오센서를 제작하거나 헤어핀의 유무를 비트연산자로 활용한 DNA 메모리 또는 나노컴퓨터 제작이 가능해질 것으로 기대된다.

앞서 살펴 본 바와 같이, 이제는 더 이상 DNA를 단지 생명현상의 시발점인 유기물로만 바라볼 것이 아니라 3차원 나노구조물 제작을 위한 유용한 기초 설계 단위로서 그 무궁무진한 공학적 응용 가능성에 주목해야 할