

보도자료



미래를 개척하는 지식 공동체



서울대학교
SEOUL NATIONAL UNIVERSITY

보도일시	2024. 8. 7.(수) / 배포 즉시
문의	연구책임자: 기계공학부 김도년 교수 / 교신저자 (02-880-1647, dnkim@snu.ac.kr)
	책임연구원: 이재영 박사 / 제1저자

DNA 결합분자에 의한 DNA 종이접기 구조체의 변형 예측 기술 개발 - 기계화학적 가변 DNA 나노구조체 설계에 활용 기대 -

■ 요약

연구 필요성	최근 DNA 종이접기 기술을 기반으로 나노구조체를 제작하여 첨단바이오 융합 분야에 활용하는 연구가 활발히 진행되고 있다. 특히 생체 내 환경 변화를 이용해 구조체의 형상을 변형시켜 필요한 기능을 수행하도록 하는 가변 기술이 주목받고 있다. 그러나 이 가변 메커니즘을 이해 하에 설계할 수 있는 모델링 및 컴퓨터 시뮬레이션 기술의 부재로 가변 기술을 구현하려면 반복적인 실험과 시행착오에 의존할 수밖에 없는 한계가 있었다. 따라서 DNA의 기하학적, 역학적 특성이 환경 변화에 따라 달라지는 구조체 변형 메커니즘을 빠르게 해석할 수 있는 효과적 방법을 연구할 필요가 있다.
연구성과/ 기대효과	김도년 교수 연구팀은 DNA와 결합하는 화합물의 농도에 따라 DNA 종이접기 구조체가 어떻게 변형될지 빠르게 예측하는 기술을 개발하는 데 성공했다. 이 기술을 사용하면 대표적인 DNA 결합분자인 브로민화 에티듐(Ethidium Bromide, EtBr)과 결합했을 때 DNA에 발생하는 기하학적, 기계적 특성의 변화를 분자동역학 시뮬레이션을 통해 정량화하고, 미리 계산된 이 정보를 이용하여 다양한 DNA 종이접기 구조체의 기계화학적 변형을 신속하게 예측할 수 있다. 향후 이 방법론은 다른 DNA 결합분자들과의 결합이나 다양한 환경 변화에 따른 DNA의 특성 변화를 정량화함으로써, 필요에 따라 원하는 모양으로 변형할 수 있는 가변 DNA 종이접기 구조체를 설계하는 데 활용되는 등 관련 기술 발전에 크게 기여할 것으로 기대된다.

■ 본문

서울대학교 공과대학은 기계공학부 김도년 교수 연구팀이 DNA 종이접기 나노구조체의 기계화학적 형상 변화를 빠르게 예측할 수 있는 기술을 개발했다고 밝혔다.

이번 연구결과는 그 성과를 인정받아 자연과학 분야의 국제적 학술지 '네이처 커뮤니케이션즈 (Nature Communications)'에 지난 7월 31일 게재됐다.

DNA 종이접기 기술은 DNA의 자가조립 특성을 활용해 원하는 형상의 구조체를 나노스케일 정밀도로 설계하고 제작할 수 있는 기술로 그 활용성이 높아 첨단바이오 융합 분야에서 활발히 연구되고 있다. 특히 생체 내 환경 변화를 이용해 구조체의 형상을 변형시켜 필요한 기능을 수행하도록 하는 가변 기술이 주목받고 있다. 그러나 이 가변 메커니즘을 이해 하에 설계할 수 있는 모델링 및 컴퓨터 시뮬레이션 기술의 부재로 가변 기술을 구현하려면 반복적인 실험과 시행착오에 의존할 수 밖에 없는 한계가 지적돼왔다. DNA의 기하학적, 역학적 특성이 환경 변화에 따라 달라지는 구조체 변형 메커니즘을 빠르게 해석할 수 있는 효과적 방법을 연구할 필요성이 대두된 이유다.

이런 문제의식에서 출발한 연구팀은 DNA와 결합하는 분자의 농도에 따라 DNA 종이접기 구조체의 형상이 어떻게 변화할지 신속하게 예측할 수 있는 방법을 찾아냈다. 연구팀은 먼저 대표적인 DNA 결합분자인 브로민화 에티듐(Ethidium Bromide, EtBr)과 결합했을 때 DNA에 발생하는 기하학적, 기계적 특성의 변화를 분자동역학 시뮬레이션을 통해 정량화했다. 이어서 이렇게 분자 수준에서 계산된 정보를 이용한 실험에서 결합분자 농도와 DNA 특성 변화와의 관계식을 구성하고 이를 DNA 구조체 해석에 적용했다. 이 과정을 거쳐 마침내 EtBr 농도 변화에 따른 DNA 종이접기 구조체의 기계화학적 변형을 빠르게 알아낼 수 있었다.

이 기술은 브로민화 에티듐 외에 다른 DNA 결합분자들과의 결합에 따른 DNA 특성 변형을 예측하는 모델로 쉽게 확장이 가능하다. 특히 결합분자의 농도를 조절해 구조체의 변형을 유도하거나 결합분자의 종류에 따라 서로 다른 모양으로 변할 수 있는 가변 DNA 종이접기 구조체를 설계하는 데 활용될 수 있어, 관련 DNA 나노기술 및 다양한 응용 연구의 발전에 크게 기여할 것으로 기대된다.

한편 서울대학교 기계공학부 김도년 교수가 지도하고 이재영 연구교수 및 김양균 연구원이 진행한 이번 연구는 과학기술정보통신부 과학난제도전 융합연구개발사업(인공모포제네시스 연구단)과 중견연구자 지원사업 등의 지원을 받아 수행됐다.

□ 연구결과

Predicting the effect of binding molecules on the shape and mechanical properties of structured DNA assemblies

Jae Young Lee, Yanggyun Kim, and Do-Nyun Kim*

(*Nature Communications*, 15, Article number: 6446, 2024)

본 연구팀은 DNA와 결합하는 분자의 농도에 따른 DNA 종이접기 구조체의 형상 변화를 빠르게 예측할 수 있는 기술을 개발했다. 대표적인 DNA 결합분자인 브로민화 에티듐(Ethidium Bromide, EtBr)과 결합하였을 때 발생하는 DNA 종이접기 구조체의 변형을 정확하게 예측 가능성을 입증했다. 아울러 실험 결과와의 비교 분석을 통해 EtBr 농도에 따른 DNA 구조체의 형상 및 강성 변화의 예측 성능을 검증하는 기술의 광범위한 활용 가능성을 시사했다.

□ 용어설명

○ DNA 종이접기(origami) 나노기술: DNA의 자가조립 성질을 이용하여 원하는 모양의 구조체를 나노 스케일 정밀도로 설계하고 제작할 수 있는 나노기술. 수천 개의 염기로 구성된 긴 단일 DNA 가닥의 특정 부분에 상보적으로 결합하는 수백 개의 짧은 DNA 가닥들의 염기서열을 공학적으로 설계하여 원하는 형상과 특성을 구현함.