# 4. 학사논문 지도교수: 김도년

4-1. DNA를 기반으로 한 나노구조물의 전산해석 및 설계

4-2. 단백질의 구조적, 역학적 특성 연구

4-3. 편모운동의 구조적, 역학적 매커니즘 연구

교수 연락처 E-mail: dnkim@snu.ac.kr
실험실: 시뮬레이션주도 구조설계 연구실 (Simulation-driven Structure Design Laboratory)
연락처 전화: 02-880-1647, 담당조교: 김영주 (youngchuchu@gmail.com)
연구실 홈페이지: ssdl.snu.ac.kr

# 4-1. DNA를 기반으로 한 나노구조물의 전산해석 및 설계

## 학사논문 지도교수: 김 도 년

최근 DNA 나노테크놀러지의 급속한 발전으로 인해 DNA의 자가조립성질을 이용한 복잡한 형상의 DNA 기반 3차원 나노구조물의 합성이 가능해졌다. 이러한 DNA를 기반으로 한 나노구조물은 특히 DNA, RNA, 단백질 등의 다양한 생체분자와 금속 나노입자 및 탄소나노튜브 등 다양한 나노구조물과의 상호작용이 뛰어나 구조적 기능 뿐만이 아닌 여러 가지 화학적, 광학적, 기계적 기능 등을 겸비한 다기능 나노구조물 개발에 적합하여 이에 관한 활발한 연구가 진행되고 있다.

하지만 설계자의 직관과 경험에 의존한 기존의 실험적 설계 방법은 원하는 형상 및 기능을 가지는 다양한 나노구조물을 설계하는데 상당한 시간적, 금전적, 인적 자원을 요구한다. 본 연구실에서는 DNA기반 나노구조물의 효율적인 설계를 위해 유한요소법을 이용한 DNA 나노구조물의 전산 해석 및 설계 알고리즘을 개발하고 있다. 학사논문 연구에서는 주어진 DNA 염기서열 및 연결성 정보로 부터 유한요소 모델을 생성한 후 비선형 해석을 통해 3차원 형상을 예측하고 나아가 예측된 3차원 구조물의 역학적 성질을 계산하는 연구를 수행한다. 아울러 이를 최적화 기법과 연계하여 주어진 설계 조건을 만족시키는 최적의 DNA 나노구조물 설계에 대한 기초 연구도 수행한다.

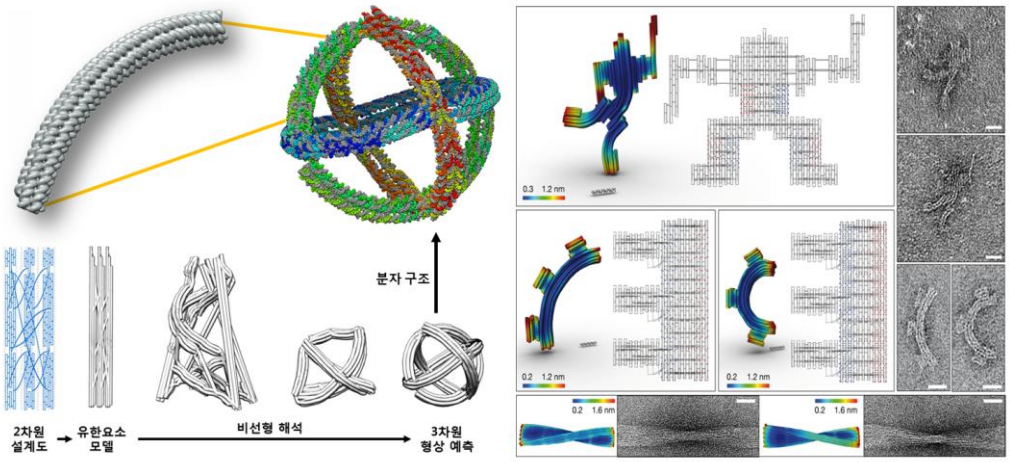


그림. DNA기반 나노구조물의 전산해석

[Ref. 1] Kim, D.N., Kilchherr, F., Dietz, H., Bathe, M. Quantitative prediction of 3D solution shape and flexibility of nucleic acid nanostructures. Nucleic Acids Research, 40: 2862-2868 (2012).

[Ref. 2] Castro, C.E., Kilchherr, F., Kim, D.N., Lin Shiao, E., Wauer, T., Wortmann, P., Bathe, M., Dietz, H. A primer to scaffolded DNA origami. Nature Methods, 8: 221-229 (2011).

# 4-2. 단백질의 구조적, 역학적 특성 연구

## 학사논문 지도교수: 김 도 년

단백질은 다양한 세포내 생물학적 기능에 참여하고 있는 핵심 구성요소이다. 각각의 단백질은 고유의 3차원 구조를 가지고 있는데 주변의 생물학적 환경이나 다른 생체분자와의 상호작용에 의해 그 구조가 바뀔 수 있다. 이러한 단백질 구조의 변형은 그 단백질이 가지는 생물학적 기능과 밀접한 관계를 가지고 있어 단백질의 구조 및 구조 변형의 역학적 특성을 이해하는 것이 단백질의 생물학적 매커니즘을 규명하는데 필수적이다.

단백질 구조의 변형은 실험적 관찰이 어려워 단백질의 구조적, 역학적 특성을 예측하는데 분자동역학 등의 수치해석 기법이 주로 이용된다. 하지만 분자동역학은 시뮬레이션 할 수 있는 자유도의 개수 및 시간의 한계로 인해 생물학적 기능과 관련이 있는, 특히 고분자량 단백질의 느린 구조 변형을 해석하는데는 부적합하다. 본 연구에서는 연속체기반 유한요소모델을 이용하여 고분자량 단백질의 구조적, 역학적 특성을 분석하는 연구를 수행한다. 특히 세포내에서 주로 기계적, 역학적 기능을 수행하는 Actin Filament의 다양한 구조 형태를 해석함으로서 구조, 역학적 특성 및 생물학적 기능과의 상관관계를 고찰한다.

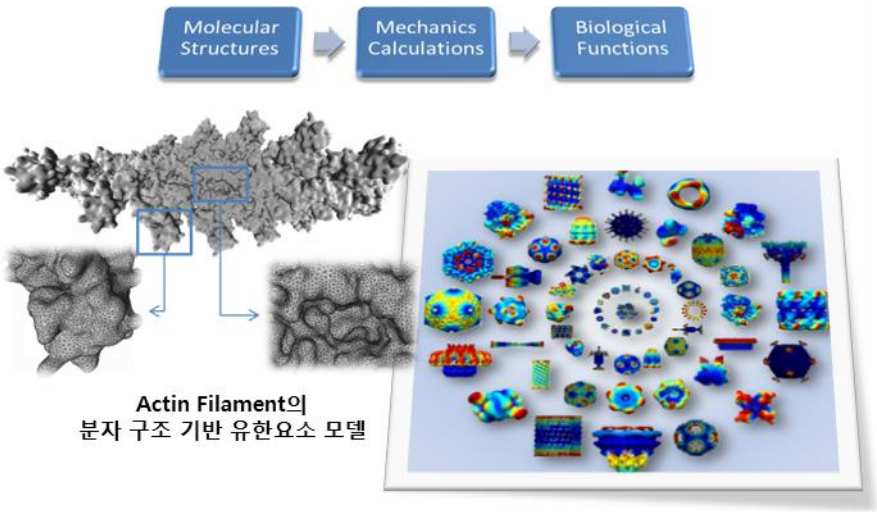


그림. 유한요소법을 이용한 단백질 구조물의 역학적 특성 해석

[Ref] Kim, D.N., Nguyen, C.T., Bathe, M. Conformational dynamics of supramolecular protein assemblies. Journal of Structural Biology, 173: 261-270 (2011).

# 4-3. 편모운동의 구조적, 역학적 매커니즘 연구

## 학사논문 지도교수: 김 도 년

편모는 다양한 미생물들의 이동에 사용되는 가늘고 긴 구조를 가진 추진기관이다. 이러한 편모의 운동, 추진 방식은 상당 기간 연구되어 왔으나 편모의 구조를 기반으로 한 분자단위에서의 정확한 매커니즘은 여전히 잘 알려져 있지 않다.

특히 최근에는 일반적인 회전 편모 운동이나 2차원 평면 상에서의 beating motion이 아닌 매우 독특한 이중 나선 운동이 아프리카 수면병을 유발하는 T. brucei의 추진 방식에서 관찰되었다. 흥미롭게도 이 미생물의 편모에는 다른 미생물들의 편모에는 없는 PFR이라는 구조물이 추가로 발견되었는데 이를 인위적으로 제거했을 경우 이 미생물은 독특한 이중 나선 운동을 하지 못하고 추진력을 잃게 된다.

본 연구에서는 우선 관찰된 이중 나선 운동을 기술하는 간단한 수학적 모델을 개발하고 유한요소해석 프로그램을 이용하여 2차원 평면 상에서의 편모운동을 구현한다. 여기에 PFR의 구조 모형을 추가하여 2차원 평면 상에서의 편모운동이 관찰된 이중 나선 운동으로 바뀔 수 있는 PFR의 구조적, 기계적 형태 및 성질에 관해 고찰함으로써 이러한 편모운동의 구조적, 역학적 매커니즘을 연구한다.

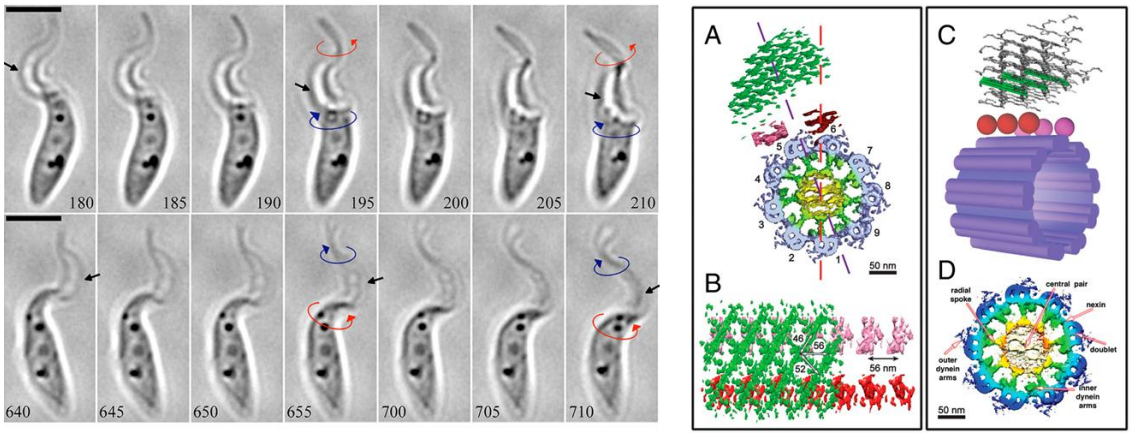


그림. T. brucei의 추진 방식 및 그 편모의 구조

[Ref] Koyfman AY, Schmid MF, Gheiratmand L, Fu CJ, Khant HA, Huang D, He CY, Chiu W. Structure of Trypanosoma brucei flagellum account for its bihelical motion. PNAS, 108: 11105-11108 (2011).