

高分子におけるソリトンと Modulated Structure

名大・工 本間重雄, 豊木博泰

京工織大・工芸 武野正三

序

最近, DNA や合成ポリヌクレオチド 2 重らせんに, 部分的に(約 10 塩基対ぐらいの長さ)開いた状態 (open state) の存在することが, 水素-重水素置換実験により確認された。¹⁾ この open state を soliton として記述する試みが行われた。²⁾ 我々は, 塩基対及び隣接する塩基間に働く potential を適当な型で導入し, soliton 構造のみならず, 他の可能な励起構造の可能性を探ってみた。³⁾

1. 塩基間に働くポテンシャル

ポテンシャルとして, 次の 2 つがある。

- (1) 向い合う塩基対間のポテンシャル: V_1
- (2) 隣接する塩基間のポテンシャル: V_2

(図 1 を見よ。)

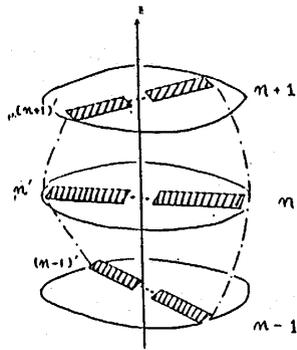
先ず V_1 を考える。 V_1 は塩基対間の水素結合より生ずるものであるから, 対をなす n 番目の塩基対に於る塩基間隔 r_n の関数である。 r_n の代りに各塩基が二次元座標の x -軸となす角 (θ_n, θ'_n) で書き, 更に (θ_n, θ'_n) の代りに次式で与えられる B-form (基底状態) からのずれの角 (φ_n, φ'_n) で V_1 を表わす。

$$\theta_n = n\alpha_0 + \pi + \varphi_n \tag{1}$$

$$\theta'_n = n\alpha_0 + \varphi'_n$$

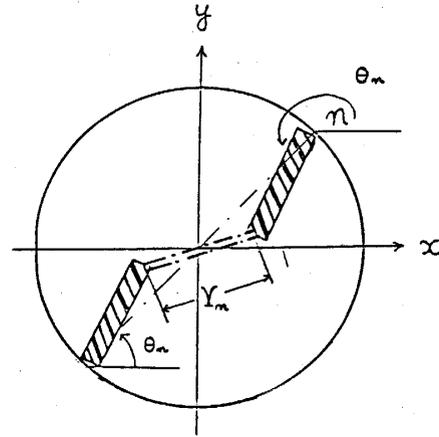
ここに α_0 は B-form での隣接する塩基対がなす角であり $\sim 2\pi/10$ 。(図 2) 又, V_1 は結局次の様になる。

$$V_1(\varphi_n, \varphi'_n) = B \{ (2 - \eta) - (\cos \varphi_n + \cos \varphi'_n) + \eta \cos(\varphi_n - \varphi'_n) \} \tag{2}$$



Interaction Potential
 (1) base pair: V_1
 (2) 隣接対 base: V_2

図 1



$$V_1(n, n') = V_1(r_m) = V_1(\theta_n, \theta'_m)$$

$$\begin{cases} \theta_n = n d_0 + \pi + \varphi_n \\ \theta'_m = m d_0 + \varphi'_m \end{cases}$$

図 2

B-form では $\varphi_n = \varphi'_n = 0$ であるから, このとき $V_1 = 0$ となる様にポテンシャルの原点を選んでおく。 V_2 としては次式で与えられる, 双極子相互作用型をとる。

$$V_2(\varphi_n, \varphi_{n-1}) = S(1 - \cos(\varphi_n - \varphi_{n-1})) \quad (3)$$

系の全ポテンシャルエネルギーは, (2), (3) の系全体の対と隣接対についての和である。

$$V = \sum_n (V_1(\varphi_n, \varphi'_n) + V_2(\varphi_n, \varphi_{n-1}) + V_2(\varphi'_n, \varphi'_{n-1})) \quad (4)$$

(4) を定常にする解の性質をみるために, V_1 を (φ_n, φ'_n) 面で書くと, $\eta = 0.5$ では (図 3) の様になる (×) 点が B-form, (・) 点が $V_1 = \text{極大}$ に対応するので $\varphi_n = \varphi'_n$ 方向と, $\varphi_n = -$

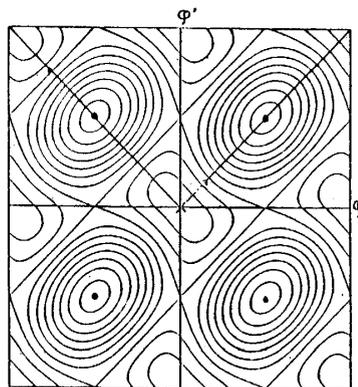


図 3

φ'_n 方向に Kink 解が存在することがわかる。

2. 定常解

$$\partial V / \partial \varphi_n = \partial V / \partial \varphi'_n = 0$$

に (4) を代入する。(φ_n, φ'_n) の代りに次式で定義される (ϕ_n, ψ_n) を用いる。

$$\phi_n = \frac{1}{2}(\varphi_n - \varphi'_n), \quad \psi_n = \frac{1}{2}(\varphi_n + \varphi'_n) \quad (5)$$

これにより、次の差分方程式を得る。

$$\begin{aligned} & \sin(\psi_{n+1} - \psi_n) \cos(\phi_{n+1} - \phi_n) - \sin(\psi_n - \psi_{n-1}) \cos(\phi_n - \phi_{n-1}) \\ &= \frac{B}{S} \sin \psi_n \cos \phi_n \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} & \cos(\psi_{n+1} - \psi_n) \sin(\phi_{n+1} - \phi_n) - \cos(\psi_n - \psi_{n-1}) \sin(\phi_n - \phi_{n-1}) \\ &= \frac{B}{S} \sin \phi_n (\cos \psi_n - 2\eta \cos \phi_n) \end{aligned} \quad (7)$$

先ず (6), (7) の連続体近似と、その解を求める。格子間隔を a_0 とし、 $z = n a_0$ とする、

(6), (7) は各々

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = \sin \psi \cdot \cos \phi \quad (8)$$

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} = \sin \phi (\cos \psi - 2\eta \cos \phi) \quad (9)$$

ここに

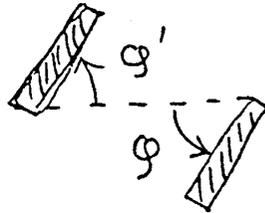
$$x = \sqrt{\frac{B}{S}} a_0^{-1} z \quad (10)$$

(8), (9) の解を求める事は容易ではない。そこで図 3 での $\varphi = \varphi'$, $\varphi = -\varphi'$ 方向の解を求める。

(I) $\varphi = \varphi'$, このとき $\phi = 0$ 。(8) は

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = \sin \psi,$$

$$\psi = 4 \tan^{-1}(e^{\pm x})$$



$$(11)$$

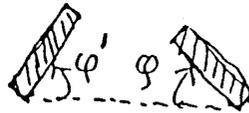
(III) $\phi = -\phi'$, つまり, $\psi = 0$ 。このとき(9)は

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} = \sin \phi (1 - 2\eta \cos \phi)$$

$$(12)$$

Double sine-Gordon 方程式を得る。 η の値に応じて, 種々の解が存在する。例えば $\eta = 1/2$ では

$$\phi = 2 \tan^{-1}\left(\pm \frac{1}{x}\right)$$



$$(13)$$

3. Modulated Structure (M.S.)

(11), (13) 以外にポテンシャル(4)を定常にする解が有るか否か。以下, これを調べてみる。連続体近似をやめて, (6), (7)をそのまま解いてみる。適当な初期条件を与えて,

(1) $\phi_n = 0$

(2) $\psi_n = 0$

の場合を調べる。

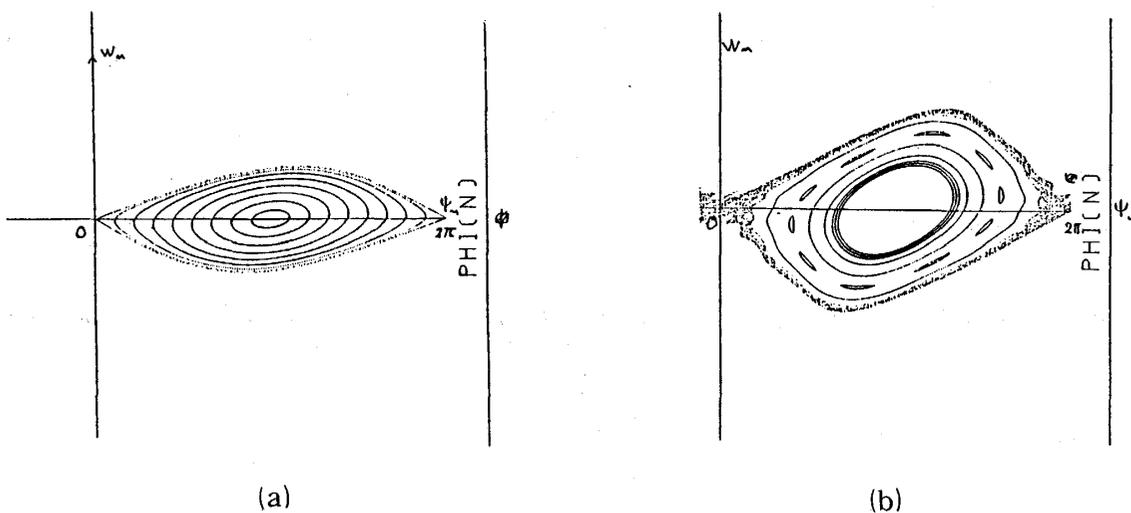


図 4

(1) $\phi_n = 0$. このとき

$$\sin(\psi_{n+1} - \psi_n) - \sin(\psi_n - \psi_{n-1}) = \frac{B}{S} \sin \psi_n \quad (14)$$

$W_n = \psi_{n+1} - \psi_n$ を導入し, (ψ_n, W_n) 上に軌跡を書くと (図 4 a, b) の様になる。

図 4 a は $(B/S) = 0.1$, b は $(B/S) = 0.3$ である。図 4 a で点 $(0, 0)$, $(2\pi, 0)$ を結ぶ曲線が解 (11) である。 B/S を大きくすると, (11) で表わされる Kink 解がなくなり, chaotic な様子が出現する。この時, 塩基対を構成する各塩基は互いに, 関連なしに, 勝手な方向を向いている。差分化により, 新しい構造の存在がわかったことになる。図 4 b から多重周期構造が出現することがわかる。

(2) $\psi_n = 0$. (7) は

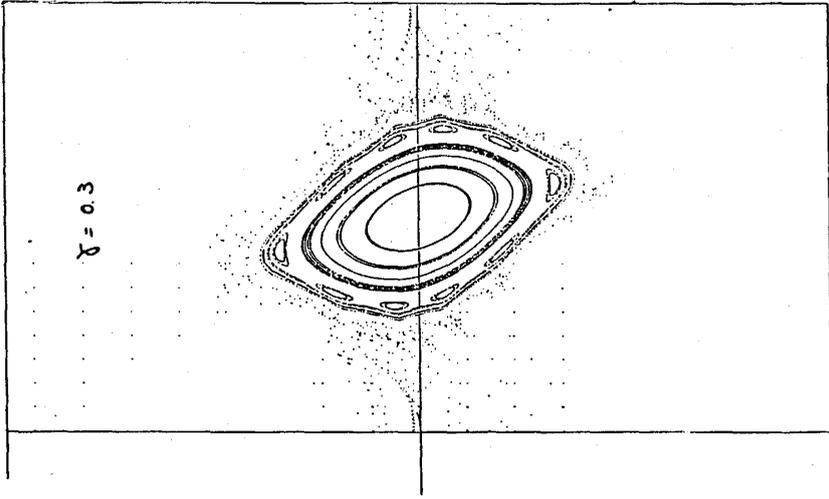
$$\begin{aligned} & \sin(\phi_{n+1} - \phi_n) - \sin(\phi_n - \phi_{n-1}) \\ &= \frac{B}{S} \sin \phi_n (1 - 2\eta \cos \phi_n) \end{aligned} \quad (15)$$

ここでも $W_n = \phi_{n+1} - \phi_n$ を導入し, (ϕ_n, W_n) 面上に軌跡を書く。 $r = (B/S)$, η を可変なパラメーターとし, 結果を (図 5 a b c) に示した。ここでは $\eta = 1/2$ を選び, $r = 0.1, 0.2, 0.3$ と変えている。

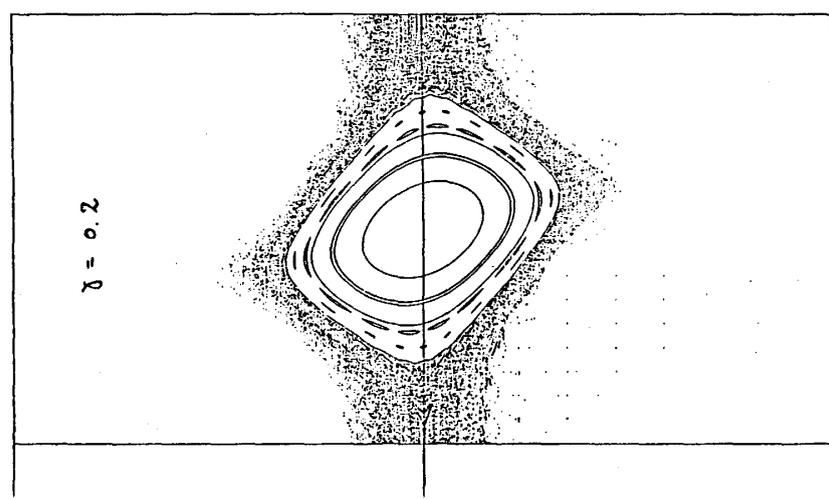
$r = 0.1$ (図 5 a) について議論する。点 P_1 と P_3 を結ぶ曲線が (13) で与えられる Kink 解である。この外側の軌跡 (群) は励起状態を表わし, 塩基対が, n の増加につれて, 規則的に回転していく事を示している。一方, 点 P_2 のまわりの閉曲線は, ポテンシャルエネルギー極大 (P_2 点がこれに相当している。) のまわりでの空間的な振動 (ゆらぎ) 状態を表わす。Kink 解の外側に多重周期構造が出現している。

r を増すと (図 5 b, c), 低い励起状態を表わす軌跡が順々に拡散していき, 点 P_1, P_3 の近くの有限領域を点でうめつくす。(図 5 b) これは, 低い励起状態が chaotic な状態に変わった事を意味しており, ここでは, 塩基の向きはバラバラで, なめらかな変化を示す様子には, ほど遠い。点 P_2 のまわりの励起状態はなめらかなまま残ってはいるが, その安定性については, はっきりしない。 P_2 のまわりに多重周期構造が, 新しく出現して来ている。

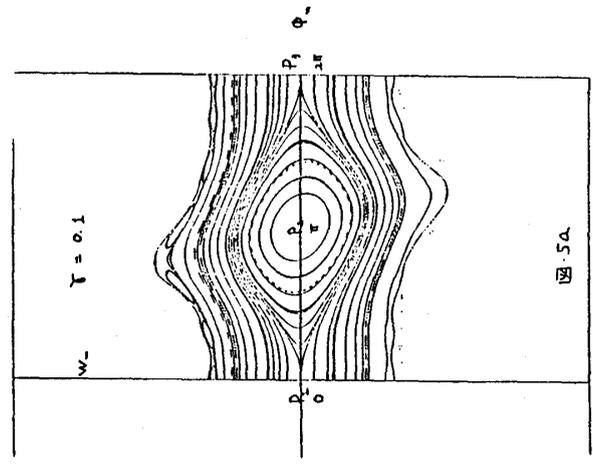
更に r を増すと (図 5 c), chaotic な領域は消え去り, 点 P_2 のまわりの, 高いエネルギーの励起状態のみが, ポテンシャル V の定常状態として残る。しかし, この軌跡の安定性については未知である。



(c)



(b)



(a)

図 5

4. 議論

DNA 2重らせんの構造を記述するのに適当と思われる塩基間ポテンシャルを導入し、その定常状態を調べた。この状態を記述する差分方程式を数値的に解いたのであるが、ポテンシャルの強さを変えることにより、励起状態としては、Kink 解以外に多重周期構造や chaotic な状態が新しく出現して来る。これが DNA の性質とどの様に結びついているか、これからの問題として残っている。

実際の DNA は (A-T), (G-C) の塩基対で構成されているが、各々、2本及び3本の水素結合で結ばれていることを思えば、考えるべき構造は、2種の異なる結合定数で構成される鎖中の Kink や Soliton を考える必要があり、これも将来の問題として残されている。

参 考 文 献

- 1) Mandel et al: J. Mol. Biol. **135**, (1979) 391.
Englander et al: Proc. Natl. Acad. Sci. **77**, (1980) 7222.
Nakanishi and Tsuboi; J. Mol. Biol. **124**, (1978) 61.
- 2) S. Yomosa; Phys. Rev. A **27**, (1983) 2120.
- 3) H. Toyoki et al; Phys. Lett **97A**, (1983) 70.
S. Takeno and S. Homma; Prog. Theor. Phys. **70**, (1983) 308.
S. Homma and S. Takeno; in preparation.