

29. DNA Supercoilのtopologyと弾性モデル

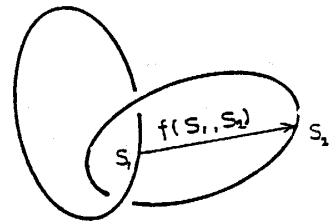
東大・教養 鶴 秀生, 和達 三樹

環状の2重らせんDNAは、2本のヌクレオチド鎖の環どうしの linking number, L_K で分類できる。 L_K は次のような積分で表わすことができる。

$$L_K = \frac{1}{4\pi} \int ds_1 \int ds_2 \frac{1}{|f|^3} \det \left(\frac{\partial f}{\partial s_1}, \frac{\partial f}{\partial s_2}, f \right)$$

ただし f は右図のようなベクトル関数である。また linking number は topological number なのでDNAの連続変形に対して不変であることがわかる。

writhing number W_r , twisting number T_w という2つの数もDNAの形を特徴づける数として定義できる。またこの2つの数は linking number と次のような式で関係づけられる。



$$L_K = W_r + T_w$$

ここで W_r , T_w は連続的に変化する数であることを注意したい。

次に linking number を与えた時のDNAの安定な形を考えるために弾性体モデルを導入し、弾性エネルギーの極小を捜すことにする。DNAを弾性体の断面が円形の棒であるとすると、弾性エネルギー U は

$$U = \int_0^L \frac{A}{2} (\theta'^2 + \sin^2 \theta \varphi'^2) + \frac{C}{2} (\psi' - \alpha_0)^2 ds$$

で表わせる。ここで θ , φ はDNA中心軸の方向ベクトルの極角, ψ はヌクレオチド鎖の中心軸まわりの角, α_0 はそのもともとのねじれ率, A , C は曲げとねじりの弾性定数である。閉じる条件

$$\int_0^L (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta) ds = 0 \tag{A}$$

の下で U の条件付変分をとると次のような連立非線形微分方程式が得られる。

$$A (\sin \theta \cos \theta \varphi'^2 - \theta'') - \lambda \cos \theta \cos \varphi + \mu \sin \theta = 0 \tag{B \cdot 1}$$

$$A (\sin \theta \varphi'' + 2 \cos \theta \varphi' \theta') + \lambda \sin \theta = 0 \tag{B \cdot 2}$$

$$C \psi'' = 0 \tag{B \cdot 3}$$

(B・3)よりただちに $\psi = \alpha s$ が得られる。条件(A)を考え $\theta' = 0$ の場合の解を考えると(B・1), (B・2)の方程式は

$$\begin{cases} \mu = 0, & \theta = \frac{\pi}{2} \\ A\varphi'' + \lambda \sin\varphi = 0 \end{cases} \quad (\text{C})$$

のようになり条件(A)を満たし、なめらかに閉じる解は

$$\varphi(s) = \frac{2\pi n S'}{L} \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{D}\cdot 1)$$

$$\sin \frac{\varphi(s)}{2} = k \operatorname{sn}(\omega_n s, k) \quad (\text{D}\cdot 2)$$

$$\omega_n = \frac{4n}{L} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2\theta}}, \quad k = 0.9089 \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots$$

(D・1), (D・2)に対する曲げの弾性エネルギー U_b^i は

$$U_b^1 = \frac{2\pi^2 A n^2}{L} \quad (\text{E}\cdot 1)$$

$$U_b^2 = \frac{16(2k^2 - 1)K^2(k) A n^2}{L} \quad (\text{E}\cdot 2)$$

で表わすことができる。DNAの鎖は同じ点を占めることができないので θ が $\frac{\pi}{2}$ からわずかにずれることを許すと(E・1), (E・2)はwrithing number W_r を使って次のように表わすことができる。

$$U_b^1 = \frac{M_1 A}{L} (|W_r|^2 + 1) \quad W_r = 0, \pm 1, \dots \quad (\text{F}\cdot 1)$$

$$U_b^2 = \frac{M_2 A}{L} (|W_r|^2 + 1) \quad W_r = \pm 1, \pm 3, \dots \quad (\text{F}\cdot 2)$$

ただし $M_1 \approx 19.739$, $M_2 \approx 14.055$ なのでwrithing number W_r が同じときには, (D・2)に対応する8の字型のほうが弾性エネルギーが小さいことがわかる。ねじりの弾性エネルギー U_t は W_r によって次のように表わすことができる。

$$U_t = \frac{2\pi^2 C}{L} (\Delta L_K - W_r)^2 \quad (\text{G})$$

ここで $\Delta L_K = L_K - \frac{L\alpha_0}{2\pi}$ である。 $|\Delta L_K|$ が増すとねじりの弾性エネルギーが大きくなる。よ

田中文彦

って $|ΔL_K|$ が増すと全弾性エネルギーを減らすために $(D \cdot 1)$ の $n = 1$, $W_r = 0$ の円から $(D \cdot 2)$ の $n = \pm 1$, $W_r = \pm 1$ の 8 の字形に DNA が変化することがわかる。より一般に $|ΔL_K|$ が増すとともにより複雑な形 (Supercoil) を取ることが予想される。このように簡単なモデルではあるが, Supercoil 間の転移を説明できる。

文 献

- 1) M. Wadati and H. Tsuru, Physica D. (to appear).
- 2) H. Tsuru, Master Thesis.

30. DNA の超らせん

— 高分子物理におけるトポロジーの一例題 —

農工大・教養 田 中 文 彦

現在知られている環状 DNA の多くは, その生活史のひとつ以上の段階で超らせん (supercoil) 構造をとる。超らせんは二重鎖の互いの絡まり合いによるトポロジー的な制限によって生じる高次構造で, その力学的, 統計的性質は生体物質の機能と関連するので興味を持たれている。ここでは DNA を曲げとねじれの 2 つの弾性定数 A, C で特徴づけられる連続的弾性棒モデル (半屈曲性高分子) で記述する。閉環状二重らせんの場合, 絡み数 Lk (トポロジー不変量) と全ツイスト数 Tw の差はライジング数 (writhing number) Wr と呼ばれ, 変形の間 Lk が一定に保たれる制限があるため複雑に曲がりくねった高次構造が安定になる。

§ 1. 空間曲線のライジング数

経路長 s で表示した, 滑らかで交点を持たない全長 L の閉じた空間曲線 $\mathbf{r}(s)$ を考える。曲線上の各点に, この曲線に垂直に単位ベクトル $\mathbf{u}(s)$ をくっつけて $\{\mathbf{r}(s), \mathbf{u}(s)\}$ のセットを“帯”と呼ぶ。 $\mathbf{u}(s)$ も滑らかに変化するものとする。この帯の各点には, 曲線の接線ベクトル \mathbf{t} と $\mathbf{v} \equiv \mathbf{t} \times \mathbf{u}$ で定義される単位ベクトル \mathbf{v} で動座標系 $\{\mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}\}$ を構成することができる。曲線に沿って進むと, この座標系は回転するが, この回転を特徴づける回転ベクトルを $\mathbf{Q} = \omega_1 \mathbf{t} + \omega_2 \mathbf{u}$