

Title	スーパーヘリックスDNAの理論(生体系のソリトン, 基研研究会「ソリトン系のダイナミクスとそれに関するカオスの問題」, 研究会報告)
Author(s)	鶴, 秀生; 和達, 三樹
Citation	物性研究 (1985), 45(1): 57-59
Issue Date	1985-10-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/91808
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

文献

- 1) A. L. Hodgkin & A. F. Huxley, J. Physiol, **117**, (1952), 500–544.
- 2) G. A. Carpenter & S. Grossberg, Lecture Notes in Biomath., **51**, (1983), 102–196.

スーパーヘリックス DNA の理論

東大・教養 鶴 秀生, 和 達 三 樹

環状の 2 重らせん DNA は, linking number L_k で分類することができる. これは topological な数なので連続変形に対して不変な数である.

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, $L_k = W_r + T_w$ という関係式をみだす.

L_k 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 U 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,

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

となる. ここで θ , φ は DNA 中心軸の接ベクトルの極角, 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

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

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.

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

$$A(\sin \theta \varphi'' + 2 \cos \theta \varphi' \theta') + \lambda \sin \varphi = 0 \quad (\text{B. 2})$$

$$C \psi'' = 0 \quad (\text{B. 3})$$

(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

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

となる。条件(A)を満たし、なめらかに閉じる解は

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

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

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

$$n = \pm 1, \pm 2, \dots$$

となり又、(D. 1), (D. 2)に対する曲げの弾性エネルギー U_b^i は

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

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

となる。DNA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

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

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

ただし $M_1 \approx 19.74$, $M_2 \approx 14.06$. W_r が等しいときには、(D. 2)に対応する8の字形のほうに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。

$$U_t = \frac{2\pi^2 C}{L} (4L_k - W_r)^2 \quad (\text{G})$$

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。よって全弾性エネルギーを減らすために (D. 1) の $n = \pm 1$, $W_r = 0$ の円から (D. 2) の $n = \pm 1$, $W_r = \pm 1$ の 8 の字形に DNA の形が変化することがわかる。より一般に $|\Delta L_k|$ が増すとともにより複雑な形を DNA が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、DNA の形の変化を説明できる。

文献

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

筋肉タンパク質におけるソリトン

椋山女学園大 右衛門 佐重雄

ミオシン分子の超らせん構造の中に 2 つの α -らせんポリペプチドがある。それぞれのヘリックスの中に、水素結合で結ばれたペプチドグループの一次元的分子鎖が 3 本あり、それらが α -らせんの構造を安定化している。われわれは問題を単純化するため一つの一次元的鎖 $\cdots \text{OCNH} \cdots \text{OCNH} \cdots \text{OCNH} \cdots$ に注目する。ペプチドグループ間相互作用は水素結合による電荷移動相互作用によって顕著な非線形性をもっている。従って、この一次元分子鎖を一つの子線形格子とみなすことができる。われわれはさきにこれを戸田ポテンシャルで記述し、戸田格子ソリトンを用いて筋収縮を説明する理論を提出したが、ここでは、水素結合相互作用を 3 次の非線形をもつポテンシャルで記述しよう。

$$\begin{aligned} V_n(r_n) &= Ar_n^2 - Br_n^3, \\ r_n &= y_{n+1} - y_n = R_n - D, \end{aligned} \tag{1}$$

ここで、 y_n は n 番目格子点 (ペプチドグループ) の変位、 r_n は n 番目の格子間隔 R_n の伸び、 $D = 4.50 \text{ \AA}$ は格子定数を表わしている。水素結合ポテンシャルは、 r に関して顕著な非対称性をもっているので、3 次の項はこのポテンシャルを近似するのに本質的に重要である。パラメーター A, B の値はフォルムアミド 2 量体の水素結合エネルギーを結合距離の関数として分子軌道法 (ab initio SCF MO) によって計算した結果得られる断熱ポテンシャルカーブから最小 2 乗