

## 凝縮転移した DNA 鎖の張力応答に関するモデル

(東大理・物理) 和田 浩史\*, 村山 能宏, 佐野 雅己

## はじめに

近年、生体分子を一分子レベルで制御・計測する技術が飛躍的に進歩するにつれて単一の生体高分子に対する豊かで興味深い性質が次々と明らかにされている。なかでも一分子の DNA が示す分子内相転移（コイル-グロビュール転移）はウイルスや細胞中における長鎖 DNA の折りたたみのメカニズムという問題と関連して、特に強い関心が寄せられてきた現象のひとつである。DNA 鎖はその固有の構造のためにまげに対する弾性を示す一方で、多価イオンに誘起されて凝縮相へ転移するという特異的な性質をあわせ持つ。前者は Gauss 鎖にまげ弾性の効果を考慮したワームライク鎖 (WLC) の枠組みで理解することができ、実験結果とのめざましい一致をみている [1]。後者についても理論・実験の両面から精力的に研究がなされ、それが分子内の不連続転移であることが立証されている [2]。

ではこれら二つの性質が複雑に関連しあう場合にはいったい何が起こるだろうか。凝縮環境におかれた DNA 一分子を光ピンセットで制御する実験では、二つの注目すべき力学応答が出現している。ひとつは伸びと張力の曲線に plateau が現れる相であり、もうひとつは伸張過程において張力の増加と急激な減少を繰り返す stick-release pattern が出現する相である。これらはいずれも理想的なワームライク鎖の示す力学応答とは著しく異なっている。前者は鎖が凝縮する転移点に近い領域で観測されるのに対し [3]、後者は多価イオンの濃度がさらに高く、凝縮が深い領域で観測される [4]。

## モデルと結果

我々はこれらの実験結果を再現する以下のような現象論モデルを提案する [5]。鎖にはその凝縮の程度に応じて実効的な鎖長  $L_a$  が定義でき、そのときの鎖の伸び  $x$  と張力  $F$  の関係は、WLC に対する公式

$$F(x) = \frac{k_B T}{l_p} \frac{x}{L_a} + \frac{1}{4(1-x/L_a)^2} - \frac{1}{4} \quad (1)$$

によって結びつくと考える。 $l_p$  は高分子の保持長である。有効長  $L_a$  は鎖の内部状態をあらわす order parameter  $\rho(s)$  ( $s$  は鎖に沿って取った 1 次元的座標) から計算される。そして  $\rho$  は図 1 に示すような仮想的なポテンシャル  $W_F(\rho)$  のもとで時間的に緩和すると仮定する。 $W_F(\rho)$  は双安定な構造をもち、2 状態の相対的な安定性は鎖に働く張力  $F$  の大きさによって決まる。また転移点直下では  $\rho(s)$  の分布を一様にしようとする拡散の効果も無視できない。

我々は、 $\rho$  に対する運動学と弾性の式 (1) を動的に結合させた方程式系を伸び  $x$  を変化させつつ数値的に解くことで、図 2 に示すような  $x$  と  $F$  の間の応答関係を得た。計算結果は実験で観測された plateau と stick-release 応答の特徴をうまく再現している。plateau の出現する左の場合には、拡散にもとづく界面のダイナミクスが重要な役割を果たす。一方、実験的には stick-release がみられる場合には鎖内部に特徴的大きさ ( $\sim 100\text{nm}$ ) のモジュール化された構造が出現していると考えられている。そこで右の図では、このような特性をモデルに反映するために、拡散の効果をなくした離散的なモデルをもちいている。

\*E-mail:wada@daisy.phys.s.u-tokyo.ac.jp

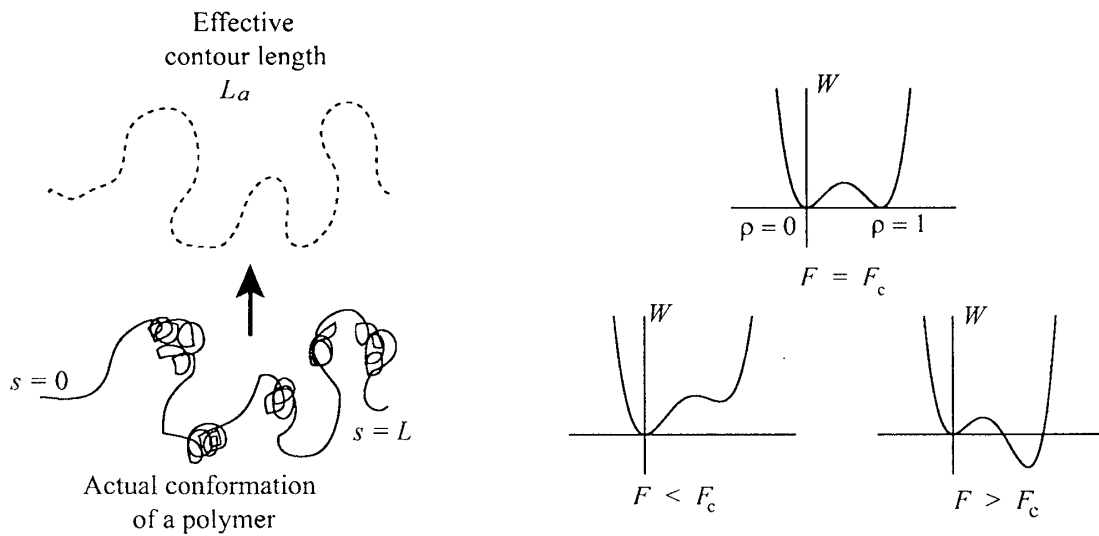


図 1: 鎖の有効長  $L_a$  の概念と、秩序変数  $\rho$  に対する仮想的なポテンシャル  $W_F(\rho)$  の張力  $F$  依存性を示した図。鎖に働く張力にはある臨界値  $F_c$  が存在して、 $F > F_c$  ではコイル状態  $\rho = 1$  が最も安定、逆に  $F < F_c$  では凝縮状態  $\rho = 0$  が最も安定であるとする。

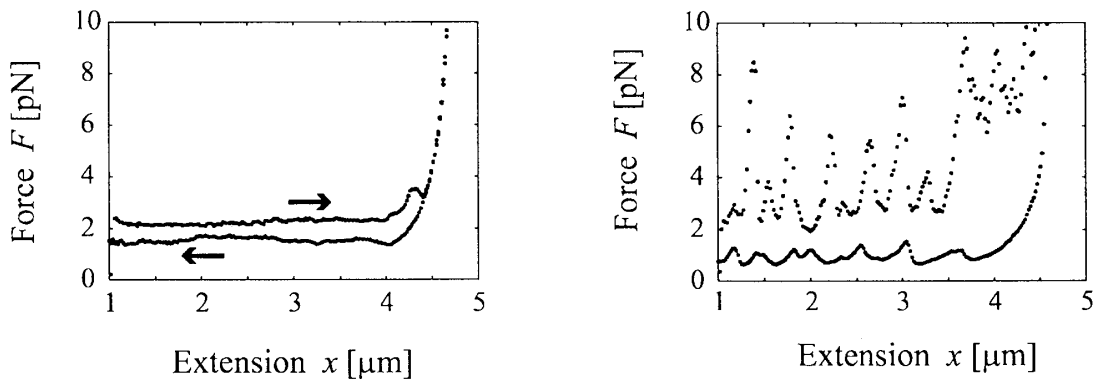


図 2: モデル計算から得られた鎖の伸び  $x$  と張力  $F$  の関係。[4] の実験条件に合わせて、鎖の全長  $L_0 = 5\mu\text{m}$ , 保持長  $l_p = 25\text{nm}$  としている。

## 参考文献

- [1] J. F. Marko and E. D. Siggia, *Macromolecules* 28 (1994) 8759
- [2] K. Yoshikawa, M. Takahashi, V. V. Vasilevskaya and A. R. Khokholov *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996) 3029
- [3] Y. Murayama and M. Sano, *J. Phys. Soc. Jpn.* 70 (2001) 345
- [4] Y. Murayama and M. Sano, in preprint
- [5] H. Wada, Y. Murayama and M. Sano, in preparation