

## Simple Model for Mechanical Responses of Collapsed DNA

東大理<sup>1</sup>、広大理<sup>2</sup>、和田 浩史<sup>1,2</sup>、村山 能宏<sup>1</sup>、佐野 雅己<sup>1</sup>

### Introduction

生体高分子は、その固有の構造のために特徴的な力学応答を示すと同時に、一般にきわめて多様な内部自由度を有する。そのため急激な環境の変化は、これらの巨大分子に種々の熱力学的不安定性を引き起こすが、それらはしばしば「より巨視的な」力学的性質と強く結びついている。ここに単一の巨大分子が示す豊かで興味深い性質が見出される。二重らせん DNA 鎖が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状態へ転移する現象はその際立った典型例である。分子の内部構造とその「かたち」の動的な相互作用は、特に生体環境においてはおそらく大変一般的であり、その理解は重要な研究課題である。

凝縮状態の DNA 一分子の広がり方を制御すると、特筆すべき力学応答が観測される [1]。高分子の凝縮転移点近傍では、鎖の張力がほぼ一定となる plateau が出現するのに対し、深く凝縮した DNA は張力が規則的な増加と減少を繰り返す stick-release 応答を示す。我々はこれらの実験結果の物理的背景を定性的に特徴付けるモデルを提案する [2]。

### Model

我々はとくに、転移点近傍における鎖のダイナミクスの理論的理解を強調する。鎖にはその凝縮の程度に応じて実効的な鎖長  $L_a$  が定義され、伸び  $x$  と張力  $F$  は理想的なワームライク鎖における関係式 [3]

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

によって結びつくとする。  $l_p$  は高分子の保持長である。有効鎖長  $L_a$  の計算は次のように行う。鎖に沿って一次元的な座標  $s$  を導入し、線素  $ds$  における「凝縮/解離の程度」を秩序変数  $\rho(s)$  によって表現する。すると各時刻における  $L_a$  は  $\rho(s)$  を  $s$  に沿って積分することで得られる。  $\rho$  に対する有効ポテンシャル  $W_F[\rho]$  は  $\rho = 0$  (凝縮相) と  $\rho = 1$  (コイル相) で極小を取る双安定な構造を持ち、二状態の相対的な安定性は鎖に作用する張力  $F$  が決める。すなわち、鎖に働く張力にはある臨界値  $F_c$  が存在し、  $F > F_c$  ならばコイル状態  $\rho = 1$  が最も安定、逆に  $F < F_c$  ならば凝縮状態  $\rho = 0$  が最安定であるとする。最後に、  $\rho$  の時間発展には散逸的なダイナミクスを仮定する。

### Results

以上により、高分子の弾性 (1) とその内部構造が動的に結びつく。鎖の伸び  $x$  をコントロールしながら方程式を数値的に解くと、図 1 に示すような相図が得られる。適切にパラメータを選べば、計算結果は実験と定量的に一致する結果を与える。図 2 は内部構造の変化を履歴として示した図であり、黒色部は凝縮相を表す。高分子内部のコイル-グロビュール転移は核生成によって発生するが、ここでは張力  $F$

がそれをコントロールする。特に  $F$  は核の成長と界面の伝播を決定的に支配するが、同時に内部構造が  $F$  自身の大きさを決める。このメカニズムがプラトーの出現をもたらす。

界面の運動に着目したさらなる理論的考察、および周期的な stick-release 現象のモデル化についても報告する。

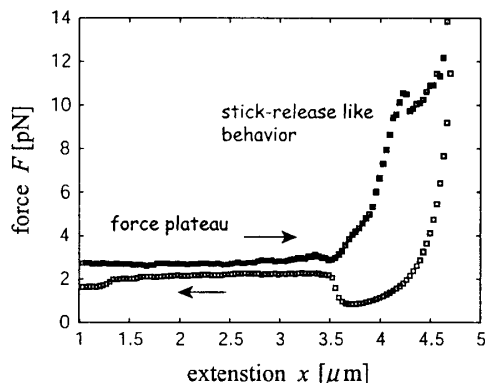


図 1: モデル計算から得られた伸びと張力の相図。鎖の全長  $L_0 = 5\mu\text{m}$  および保持長  $l_p = 25\text{nm}$  である。伸張時には、鎖内部における凝縮相のピン止めによるとおもわれる stick-release 的な応答も見られる。

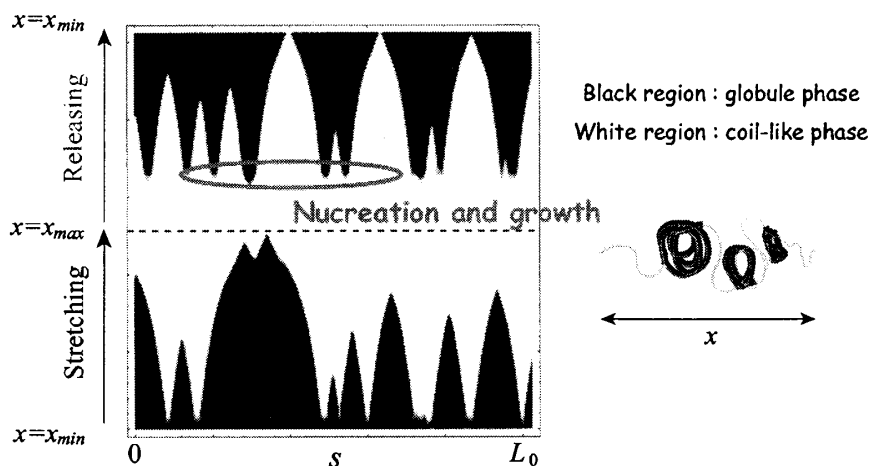


図 2: 内部構造の動的な状態遷移を高分子の伸び  $x$  に対して示した図。右側は説明の為に描いたイラストであり、黒い部分が  $\rho \sim 0$  の凝縮相に相当する。

## 参考文献

- [1] Y. Murayama, Y. Sakamaki, and M. Sano, Phys. Rev. Lett. **90**, 018102 (2003)
- [2] H. Wada, Y. Murayama, and M. Sano, Phys. Rev. E **66**, 061912 (2002)
- [3] J. F. Marko and E. D. Siggia, Macromolecules **28**, 8759 (1994)