

生体系におけるソリトン

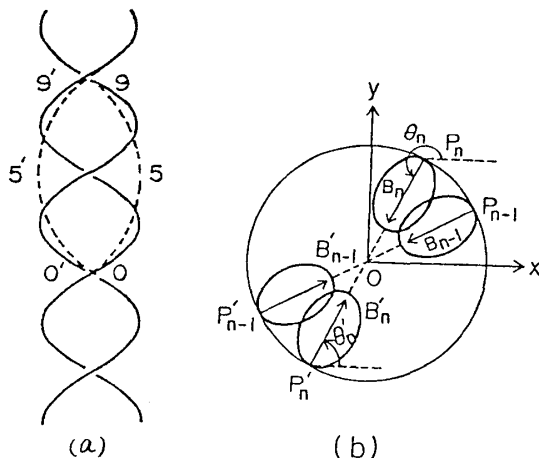
名大・理 右衛門佐 重 雄

A. Solitary Excitations in DNA Double Helices

DNAや合成ポリヌクレオチド2重らせん内の水素は、これらの分子が秩序構造にあるという条件下で溶媒の水素と交換することが知られている。最近、DNAや合成ポリヌクレオチド2重らせんに開いた状態 (open state) の存在することが、Englanderら¹⁾やNakanishi-Tsuboi²⁾らの水素-重水素交換実験によって実証された。Englanderらは2重らせんに沿って動いている open unit を推定し、kinetic experiments のデータから開いた状態は10塩基対ぐらいの長さであると推定している。(図(a))

また、彼等は、振子がついた2本の平行な棒の力学モデルを提出し、open state を一つの solitary excitation として記述できることを示唆した。われわれは最近DNA2重らせんに対する一つのソリトン理論を提出した³⁾

DNAやポリヌクレオチド2重らせん(図(a))のhelix軸(z)に垂直な面への塩基の射影は図(b)のように示される。ここで B_n, B'_n は相補



的な2つのstrandsに所属する相補的な塩基対で、水平面内における B_n, B'_n の方向はそれぞれbases B_n, B'_n がstrandsにくっついている点を通り、z軸に平行な軸 P_n, P'_n のまわりの回転角 θ_n, θ'_n によって定義される。DNA塩基のz軸に垂直な面での運動を記述するHamiltonianは次式で与えられる。

$$\mathcal{H} = \sum_n \left[\frac{1}{2} I (\dot{\theta}_n^2 + \dot{\theta}'_n^2) + B \{ 1 - \cos(\theta_n - \theta'_n - \pi) \} \right. \\ \left. + S \{ 1 - \cos(\theta_n - \theta_{n-1} - \alpha_0) \} + S \{ 1 - \cos(\theta'_n - \theta'_{n-1} - \alpha_0) \} \right] \quad (1)$$

ここで、 I はBasesのP軸まわりの平均の慣性能率、 B は相補的な塩基対間の平均の水素結合エネルギー、 S はintrastrand塩基対間の平均のstacking energyである。 θ_n と θ'_n に関するHamilton方程式は次式で与えられる。

$$\begin{aligned}
 I \ddot{\theta}_n + B \sin(\theta_n - \theta'_n - \pi) + S \{ \sin(\theta_n - \theta_{n-1} - \alpha_0) \\
 - \sin(\theta_{n+1} - \theta_n - \alpha_0) \} = 0, \\
 I \ddot{\theta}'_n - B \sin(\theta_n - \theta'_n - \pi) + S \{ \sin(\theta'_n - \theta'_{n-1} - \alpha_0) \\
 - \sin(\theta'_{n+1} - \theta'_n - \alpha_0) \} = 0
 \end{aligned} \tag{2}$$

連続近似で,

$$\begin{aligned}
 I \frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} - S a^2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} + B \sin(\theta - \theta' - \pi) = 0, \\
 I \frac{\partial^2 \theta'}{\partial t^2} - S a^2 \frac{\partial^2 \theta'}{\partial z^2} - B \sin(\theta - \theta' - \pi) = 0
 \end{aligned} \tag{3}$$

(2)と(3)式の差をとれば, 塩基対の distorsion angle $\phi = \theta - \theta' - \pi$ に関して sine-Gordon 型方程式が得られる。

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - \frac{1}{v_0^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \frac{1}{l^2} \sin \phi, \tag{4}$$

$$v_0 = \sqrt{\frac{S}{I}} a, \quad l = \sqrt{\frac{S}{2B}} a. \tag{5}$$

和をとると, $\varphi = \theta + \theta' + \pi$, 波動方程式が得られる。

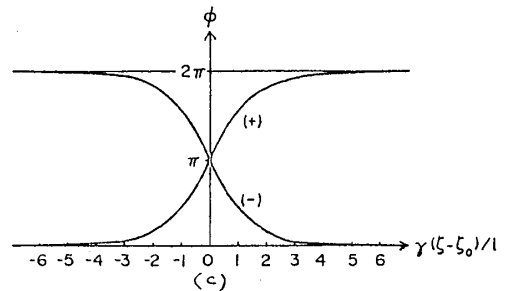
$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} - \frac{1}{v_0^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = 0 \tag{6}$$

場の方程式(4)の kink と antikink のソリトン解

$$\phi = 4 \tan^{-1} e^{\pm \frac{r}{l} (z - vt - \zeta_0)}, \quad r = (1 - \frac{v^2}{v_0^2})^{1/2}, \quad (v < v_0), \tag{7}$$

はそれぞれ正と負のヘリシティをもった open state に対応している (図(c))。エネルギー B , S に関する分子軌道法的計算の結果から reasonable な B , S の値として

$$2B \simeq 0.10 \text{ eV}, \quad 4S = 0.10 \text{ eV} \tag{8}$$



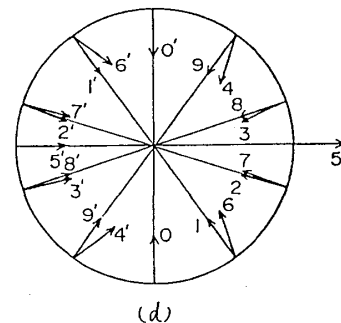
を推定すると, l とソリトンの速さの上限 (波動 ϕ の速度) v_0 の値が評価され;

$$l = 0.5 a, \quad v_0 = 1.1 \times 10^4 \text{ cm/sec}, \tag{9}$$

開いた形のエネルギー E_p や開いた配置の長さ Δz についての理論値

$$E_p \simeq 0.20 \sim 0.4 \text{ eV}, \quad \Delta z \simeq 7a \quad (10)$$

は、キネティックな実験データから推定された値 6 kcal/mol (0.26 eV)¹⁾, 8.1 kcal/mol (0.35 eV)²⁾ $\Delta z \simeq 10a$ と同じ程度の値になる。また open state をヘリックス軸に垂直な平面に射影すると図(d)のようになる。矢印は base の方向を示している。



1) Mandel et al.: J. Mol. Biol. **135**, 391 (1979).

Englander et al.: Proc. Natl. Acad. Sci. **77**, 7222 (1980).

2) Nakanishi and Tsuboi: J. Mol. Biol. **124**, 61 (1978).

3) S. Yomosa: Phys. Rev. A (accepted).

B. Solitary Waves in One-Dimensional H-Bonded Systems

最近、一次元水素結合系の一つのモデルが Halobacterium Halobium の紫膜におけるプロトンチャンネルとして提出された。この channel は Halobacterium Halobium の Bacteriorhodopsin のポリペプチドにおける 4 つのヘリックスで構成されていて、(Asp_G^{115} or Asp_D^{212}) $\cdots \text{Tyr}_E^{150} \cdots \text{Tyr}_E^{147} \cdots \text{Tyr}_B^{57} \cdots \text{Tyr}_C^{83} \cdots \text{Tyr}_B^{64} \cdots \text{Tyr}_C^{79} \cdots \text{Glu}_C^{74}$ で表わされている。このような一次元水素結合系 $\cdots \text{O}-\text{H} \cdots \text{O}-\text{H} \cdots \text{O}-\text{H} \cdots$ における protons の動的な性質をプロトンの運動と格子の変形との coupling を取り入れて取り扱う^{1), 2)}

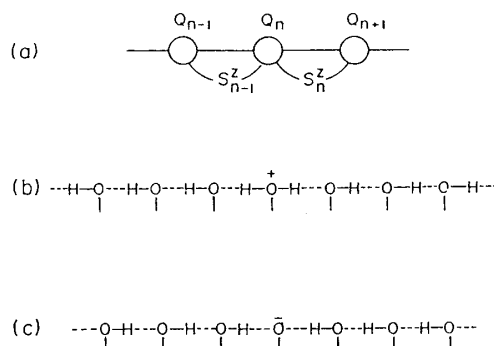
proton の polarization と lattice の displacement をそれぞれ連続近似で $S_n^z/S \equiv u_n(\pm) \rightarrow u(x, t)$, $Q_n(t) \rightarrow Q(x, t)$ と表わすと (図(a)),

polarization field $u(x, t)$ と displacement field $Q(x, t)$ との couple した一対の式をうるが、

$u(x-vt)$, $Q(x-vt)$ の形の解を assume すると、 u に関して、Klein-Gordon 型の方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{c_0^2 \left\{ 1 - \frac{\kappa^2}{v_0^2 - v^2} \right\}} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{1}{mc_0^2 \left\{ 1 - \frac{\kappa^2}{v_0^2 - v^2} \right\}} \frac{dv}{du}$$

をうる。ここで $v(u) = -2\alpha S(1-u^2)^{1/2} - JS^2 u^2$ は場の potential である。この方程式は f



$(v) \equiv 1 - v^2/c_0^2 - \kappa^2(v_0^2 - v^2) > 0$ (図(d)) をみたす v の領域で soliton 解をもっている (図(b)(c)(e))。

$$\varphi + 2 \cot \varphi_0 \tanh^{-1} [\tan(\varphi/2) - \tan(\varphi_0/2)] = \pm s,$$

$$\varphi = \sin^{-1} u, \quad \varphi_0 = \sin^{-1} u_0,$$

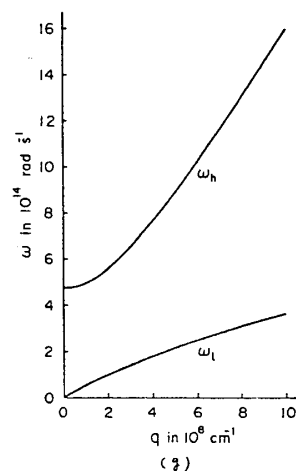
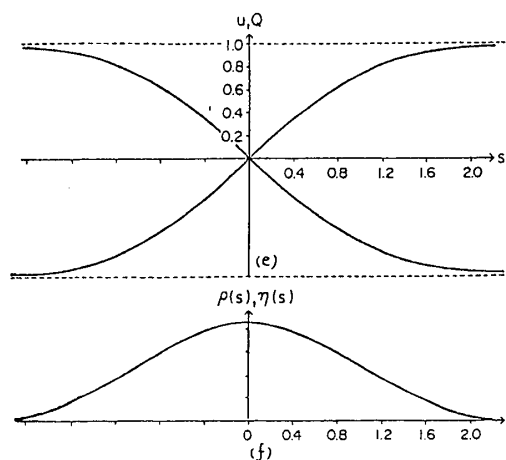
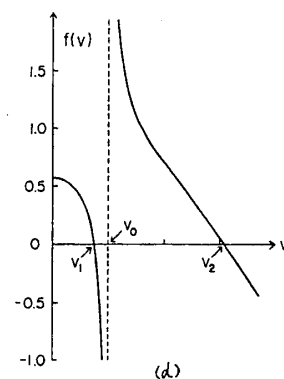
$$s = (x - vt - \zeta_0)/\xi, \quad \xi = \frac{a}{\sqrt{2}} \{f(v)\}^{1/2}$$

これらのソリトンの kink 解は D_t default (H_3O^+ ion) に anti-kink 解は L_t default (OH^- ion) に相当している。図(f)の $\rho(s)$, $\eta(s)$ はそれぞれ電荷密度と lattice deformation の割合を示している。図(d)からわかるように $f(v) > 0$ をみたす領域が2つあり、領域 $0 < v < v_1$ は slow mode の soliton に、領域 $v_0 < v < v_2$ は fast mode の soliton に対応している。前者は lattice の contraction を伴って走り、後者は lattice の expansion を伴って走るソリトンである。図(d)で $f(v) < 0$ がみたされる v の領域 $v_1 < v < v_0$ と $v > v_2$ で small oscillation の解 $u = \pm u_0 + A \sin[q(x - vt) + \theta] = \pm u_0 + A \sin[qx - \omega t + \theta]$ が存在する。これらはそれぞれ、low frequency phononmode と high frequency phononmode に対応し、それらの dispersion relations は図(g)で与えられている。

- 1) S. Yomosa: J. Phys. Soc. Japan **51**, 3318 (1982).
- 2) S. Yomosa: J. Phys. Soc. Japan (submitted).

C. Davydov Soliton in α -Halix

muscle contraction の molecular theory を構成するために、1972 年以来、Davydov は α -Herical protein の H-bonded polypeptide chains における soliton theory をつぎつぎに提出した。これは amide I の振動励起に lattice deformation が couple した長寿命の solitary excitation を formulate したものである。彼は、optical な励起ではこのような soliton 励起は実現しないが、ATP 分解という化学反応(長寿命)によって、



石井 晃

lattice の歪を伴ったペプチドの C=O bond の振動励起が実現する可能性を指摘し、この deformation を伴ったソリトン波がミオシンとアクチンの相対的な sliding における力の発生の起源であるとした。Davydov soliton は次の形の nonlinear Schrödinger 方程式でかけられる。

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - A + J \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + G |a(\xi, t)|^2 \right\} a(\xi, t) = 0$$

ここで、 $\xi = z/R$ 、 $a(\xi, t)$ は amide I vibration の励起の probability amplitude、 A は energy、 J は amide I vibrational excitation の dipole-dipole coupling、 $G = 4\chi^2/\kappa(1-v^2/v_0^2)$ で、 χ は amide I vibrational excitation と lattice deformation との coupling constant であり、 v_0 は sound velocity で、これは solitary wave の velocity の上限を与えている。方程式の解は

$$|a(\xi, t)|^2 = \frac{\mu}{2 \cosh^2 [\mu(\xi - \nu t - \xi_0)]}, \quad u = \frac{\chi^2}{\kappa J(1-v^2/v_0^2)}, \quad \nu = v/R$$

で与えられ、lattice distance の relative reduction を表わす $\rho(\xi, t)$ の波も同型の局在波

$$\rho(\xi, t) = \frac{\chi\mu}{\kappa(1-v^2/v_0^2) \cosh^2 [\mu(\xi - \nu t - \xi_0)]}$$

で表わされる。最近 Scott¹⁾ は数値計算によって α -Helical protein に soliton 波ができるための χ -値の範囲として

$$0.35 \times 10^{-10} \text{ N} \leq \chi_1 \leq 0.6 \times 10^{-10} \text{ N}$$

をみいだしている。

1) A. C. Scott: Phys. Rev. A 26, 578 (1982).

物性における Kubo-Namiki-Ohba Soliton bag

早大・理工 石井 晃

物性に現われる soliton には強磁性体におけるものの様に構造それ自体がトポロジカルにソリトンを形成している場合もあれば (sine-Gordon 系)、そうでないノントポロジカルなソリトン (KdV, NLS 等) もある。この種の分類は T. D. Lee¹⁾ によって括められたが、彼に拠ればノントポロジカルなソリトンには構造からの要請が無いから、孤立波を維持するためには波の拡がりを妨げる引力場が必要である。境界条件としてその引力場が与えられてしまっている系もあるだろうが、ソリトンとして興味があるのは引力場が孤立波の振巾の関数として