

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

梶山女学園大 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非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

法で, $A = 0.62 \text{ eV}/\text{\AA}^2$, $B = 0.83 \text{ eV}/\text{\AA}^3$ と決定される.

連続近似で, $nD \rightarrow x$, $r_n \rightarrow r(x, t)$ で, 非線形格子の運動方程式はKdV方程式に帰着することはよく知られている;

$$u_\tau - 12uu_\xi + u_\xi\xi\xi = 0, \quad (2)$$

ここで,

$$\xi = \frac{x}{D} - \sqrt{\frac{2A}{m}} t, \quad \tau = \frac{1}{24} \sqrt{\frac{2A}{m}} t, \quad u = \frac{3B}{A} r. \quad (3)$$

格子の収縮が強く局所化していることを表わすためにデルタ関数の形をした特殊な初期条件をとる. この初期値

$$u(\xi, 0) = -\kappa \delta(\xi - \xi_0) \quad (4)$$

に対して, 逆散乱法は時間経過とともに一つの単一ソリトン解が出現してくることを示している;

$$r(x, t) = -\frac{A}{12B} \kappa^2 \text{sech}^2 \left[\frac{\kappa}{2D} (x - vt) - \delta \right], \quad (5)$$

$$v = v_0 (1 + \kappa^2/24), \quad v_0 = \sqrt{\frac{2A}{m}} D, \quad \delta = \frac{\kappa}{2} \xi_0 - \frac{1}{2} \ln 2. \quad (6)$$

ミオシン分子の頭部がアクチン分子と接触して励起複合体(ミオシン-ATP-アクチン)をつくり, これが加水分解反応をおこす過程で放出すべきエネルギーが, ミオシンの一つの α -らせんの中にあるペプチドグループの一次元鎖の端で, 格子間隔の局所的な初期縮みをつくるのにつかわれたと仮定すると, (5)の形をもった格子収縮或はこれに対応する格子張力; $f = -\partial V/\partial r = -2Ar + 3Br^2$, の単一ソリトンが時間経過とともに現れてくる. このソリトンはミオシン分子に局所的な強い曲げをひき起す. このわん曲部分は, ミオシンの頭(クロスブリッジ)の端からミオシン分子をたばねている太いフィラメントの方へ移動するので, ミオシン分子の端は回転を伴った曲げ運動を起すであろう. 回転を伴うというのは, われわれの一次元格子は α -らせんの中でらせん対称性をもっているからである. 実際はミオシンの頭がアクチンフィラメントの2重らせんの表面に接触しているので, ミオシンの頭がアクチンフィラメントをひっかこうとして力を加える. ミオシンの太フィラメントとアクチンの細フィラメント

の相対的な滑りによっておこる筋収縮は、この力によって起されていると考えられる。この過程で行われる力学的仕事によってソリトンのエネルギーと振幅はゼロになるまで、そしてソリトンの速度は $v_0 \simeq 4.5 \times 10^5 \text{ cm/sec}$ になるまで減少する。最初につくられるソリトンの特徴づけている κ の最大値はソリトンのエネルギーを ATP の加水分解で解放されるエネルギー 0.49 eV に等しいとおいて近似的に評価される； $\kappa \simeq 2.9$ 。格子収縮或はこれに相当する格子張力のソリトンの最大振幅は

$$|r/D|_{\max} = 0.12, \quad f_{\max} = 2.0 \times 10^{-4} \text{ dyne} \quad (7)$$

と評価され、ソリトン波の幅は $2D/\kappa = 3.2 \text{ \AA}$ と評価される。これらは驚くべき合理的な値を与えている。筋肉が 1 kg 重 (10^6 dyne) の程度の力を出すために同時に働かなければならないミオシン分子の数は(7)の $f_{\max}$ の値から約 $N \simeq 10^6 / 10^{-4} = 10^{10}$ と推定される。一方、脊椎動物の横紋筋は約 100 万の筋繊維からなる組織であり、各筋繊維は同様なサルコメアからなる約千のミオフィブрилを含んでおり、サルコメアの中心は約 2～3 百のミオシン分子を含む太いフィラメントで占められている。結局、一つの横紋筋は約 10^{11} 個のミオシン分子を含んでいる。従って、上に述べた理論的な評価は横紋筋の中にあるミオシン分子の数について合理的な数を与えている。ミオシン分子の頭が行うひっかき運動 (scratching motion) の時間は (ミオシンヘッド或はクロスブリッジの長さ) / (ソリトンの速さ) $\simeq 250 \text{ \AA} / 4.5 \times 10^5 \text{ cm/s} \simeq 6 \text{ picosecond}$ の程度と推定される。picosecond の程度の周期をもったミオシンの頭の運動を検出する実験が切望される。

Polypeptide 系と分子性結晶における vibron soliton

京工織大・工芸 武 野 正 三

1. INTRODUCTION

A characteristic feature which exists in biologically important macromolecules such as proteins and DNA is their structural and dynamical flexibility. This reflects the fact that many functional properties of these molecules cannot be completely understood from the average structure as determined by x-ray analysis. For example, reaction rates of enzymes may be correlated with the structural and dynamical flexibility of proteins, while local structural fluctuations in DNA may be a part of what proteins recognize. As is well known, recent development of nonlinear science has yielded new and interdisciplinary concepts such as solitons, universal routes to chaos, fractals, pattern selection and so