

応用力学研究所研究集会報告 No.17ME-S2  
「非線形波動および非線形力学系の現象と数理」 (研究代表者 梶原健司)

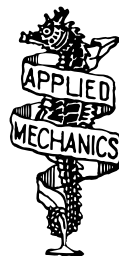
**Reports of RIAM Symposium No.17ME-S2**  
*Phenomena and Mathematical Theory of Nonlinear Waves and Nonlinear Dynamical Systems*  
Proceedings of a symposium held at Chikushi Campus, Kyushu University,  
Kasuga, Fukuoka, Japan, November 9 - 12, 2005

Article No. 03

# 生体高分子は何故ヘリカルな構造をしているだろうか

武野 正三 (TAKENO Shozo)

(Received January 31, 2006)



Research Institute for Applied Mechanics  
Kyushu University  
May, 2006

# 生体高分子は何故ヘリカルな構造をしているだろうか

長崎総合科学大学新技術創成研究所 武野正三

## I. Introduction

DNA やタンパク質などの生体高分子は、その1次構造は1次元的であるが、2次構造はらせん状である(図1)。そして、このらせん構造は、エネルギーを貯めたり、他の分子を認識したり、触媒として働いたり、情報を伝えるという生体高分子の機能と深く関わっていることが生化学的に明らかにされている。換言すれば、これら生体高分子の機能発現はその形状の変化、即ち conformational change を伴っている。その例は以下の如くである。

1. DNA の open structure: 生体内のDNA は決して rigid な2重らせん構造を作っているのではなく、その構造は外部環境の下に絶えず揺らいでいる。特に、local open state と呼ばれるらせん構造が局所的にほどけた場所ではメッセンジャー RNA や enzyme が入り込んでそこでDNAの基本的な機能である塩基配列を通じて遺伝情報の読み取りが行われている。

2. protein

たんぱく質は生体の基本的な構成要素であり、それは遺伝情報の指令を受けて、生体の機能の殆どすべてを担っていると言っても過言ではない。たんぱく質は分子機械ともよばれているが、通常の機械に比べてそれは柔軟な構造を持ち、驚く程良い効率で仕事、エネルギー変換等を行っている。また、触媒の行う生体反応は一般の化学工場と比べて遥かに精密で効率の良い化学反応を担っている。

## II. 物理学からみた生体系の特性-非線形モードの観点からの此迄のアプローチ-

物理学の観点から生体系をみると、それは凡そ以下のような特性を持っている。

(1) 生体系は本質的に外部環境と接触している非保存系であり、熱平衡から大きく外れた系である。また、生体のダイナミクスは、その柔軟な構造とともに、高度の非線形性を持ち、一種の self-sustained excited state とみなすことが出来る。

(2) 生体は一般にソフトな物質から構成されているが、そこではいろいろな触媒作用とともに、生化学的なエネルギーが機械的なエネルギーに変換されている。この分子機械は低いエネルギーの下で働き、通常のエンジンに比べて遥かに高い効率を持っている。生化学的なエネルギーの典型的なものの一つはATP反応であるが、このエネルギーは一時蓄えられて後に機械的なエネルギーに利用される。蓄えられている時間は最大1秒程度であり、その時間は分子の振動の周期  $10^{-12}\text{s} \sim 10^{-10}\text{s}$  や物性の問題に固有な時間に比べて遥かに長い。

(3) 「非線形波動, 非線形力学系の現象と数理」からみた生体系

生体系に物理的に興味ある非線形モードが存在するとき、それが生体の機能に何等かの係わり合いを持っているかも知れないと考えたくなる。非線形の物理・数理の観点から生体系をみるとき考慮しなければならないことは非線形モードそれ自身以外に凡そ以下のようなものである。

(a) ヘリカルな構造、折り畳み構造等生体高分子の形状を先ず取り入れ、それと生体機能との関連を考察する。

(b) 外部環境と接触する（特に水溶液のなかにある）生体高分子のモデルを設定する。

(4) 非線形モードの観点からの物理屋、数理科学屋の此迄のアプローチ

生体系の問題の研究において、要素還元的方法論・哲学の伝統の影響を受けた物理屋、数理科学屋は此迄余りにも簡単で且非現実なモデルを用いて来たが、このことは、しばしば、生化学者等からの強い反発を受けている。我々は狭い領域に閉じこもって自己満足に陥ることなく、彼等の反駁に耳を傾け、彼等を説得出来るに足るモデル・理論を構築すべきであろう。批判の具体的な例は凡そ以下の通りである。

(a) DNA, alpha helics 等の生体高分子を単に直線状の分子、物理での 1 次元格子として取り扱っている。DNA: simple ladder model、protein: simple linear chain model。

(b) これ等を保存系として取り扱っている。また、水分子の影響等は全く無視されてい。生体系の生体系たる所以はそれが絶えず外部環境と接触した非保存系であり、熱平衡から大きくはずれた系であるということである。

(c) 遞減摂動法、連続体近似がしばしば用いられているが、DNA、蛋白の機能の発現には夫々の機能に応じて特有の分子配列とその高次構造が関わっている。このような状況において、連続体近似等を用いることは、例外を除いて、一般的に凡そ意味のないことであろう。

(d) モデル方程式の例

蛋白高分子における energy storage と DNA 高分子における local open state 形成のモデルを取り上げる。

(i) *Davydov soliton, vibron soliton in energy transfer in proteins:*

分子機械としての蛋白高分子における energy storage の問題において、先ず、Davydov は  $\alpha$ -helical protein において ATP 反応により解放された化学的エネルギーが amid-I 振動の exciton に self-trapping の形で蓄えられるというモデルを提案した [1]。そのモデル方程式は以下のようなものである。

(i.1) *Davydov equations*

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = \epsilon a_n - J(a_{n+1} + a_{n-1}) + \chi(u_{n+1} - u_{n-1})a_n, \quad (1)$$

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = K(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \chi(|a_{n+1}|^2 - |a_{n-1}|^2)a_n, \quad (2)$$

此処に、 $a_n, u_n, J, K, M, \chi$  は (1次元) 格子における格子点  $n$  におけるアミド-I 振動励起子の消滅演算子、その点における水素結合集合体の上の原子の平衡位置からの変位、励起子の transfer energy, acoustic phonon のバネ定数、acoustic phonon を担う原子の質量、exciton-phonon interaction の定数である。最終的には amid-I 振動の exciton について非線形 Schrodinger (NLS) 方程式が導かれ、self-trapping は NLS 方程式のソリトンとして理解できるというものである [1,2]。此処での物理的状況はプラズマ物理におけるプラズマとイオン音波の相互作用によるソリトンの形成と同一である。

(i.2) *vibron-soliton equations*

Davydov model Hamiltonian には amid-I vibrational exciton に対して物理的にいくつか不十分な点がある。この欠陥を除き、より現実的なモデルとして提出されたのが Takeno による vibron soliton の概念で [3], それは以下のモデル Hamiltonian により記述される。

$$\mu\ddot{q}_n + v'(q_n) - 2 \sum_m J(n, m)q_m + V'(q_n)(u_{n+1} - u_{n-1}) = 0, \quad (3)$$

$$M\ddot{u}_n - K(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) - [V(q_{n+1}) - V(q_{n-1})] = 0, \quad (4)$$

此処に、 $q_n, v(q_n), J(n, m), \mu, V(q_n)$  は ( 1 次元 ) 格子における格子点  $n$  におけ amide-I 振動の相対変位、アミド基の間の相互作用の結果生ずる amide-I 振動励起即ち vibron の on-site エネルギー ( 振動エネルギー )、格子点  $n, m$  間の vibron の transfer エネルギー、amide-I 振動の reduced mass, inter-site vibron-phonon 相互作用の定数である。  $M, K$  は Davydov 方程式の場合と同じ意味を持っている。  $v(q_n), V(q_n)$  の一般形は  $v(q) = (\mu\omega_0^2/2)q^2 + (b/4)q^4$ ,  $V(q) = (\chi/2)q^2 + (B/4)q^4$  で与えられる。此処に、 $\omega_0$  は amide-I 振動の固有振動数、 $b, B$  は定数であり、 $\chi$  は前と同じ意味を持っている。ここでは、vibron という集団励起の局在モードが self-trapping と identify される。筆者は欧米の研究者達と最近約 20 年間の間にいろいろ論戦を展開して来たが、coherent-state, exciton-number-non-conserving の概念を持つ後者のモデルの方が物理的にみて良いのではないかと今でも思っている。

## (ii) DNA に於ける非線形励起のモデル方程式

DNA における local open state の存在を塩基対の集団運動におけるソリトン、あるいは大振幅運動に付随する局在モードという概念から説明せんとするものである。この問題のキーポイントの一つは 2 重ラセンのなかの塩基対の運動をどのような観点から捉えるかということである。その研究は凡そ以下の二つ、(a) base stretching model, (b) base twisting model、に大別される。

### (ii.1) Peyrard-Bishop model: base-stretching model

2 重ラセンを直線状格子の対とみなし、一方の格子の  $n$  番目の塩基の平衡位置からの変位を  $u_n$ , 他方のそれを  $v_n$  として相対変位  $y_n = u_n - v_n$  を導入し、塩基対のポテンシャルエネルギーに Morse potential を用いると運動方程式は

$$m\ddot{y}_n = K(y_{n+1} + y_{n-1} - 2y_n) + 2aD(e^{-ay_n} - 1)e^{-ay_n} - \xi m\dot{y}_n, \quad (5)$$

$$\xi = \frac{1}{M} \left[ \sum_n m\dot{y}_n^2 - NT \right]. \quad (6)$$

の形を取る [4,5]。パラメーター  $M$  を含む (6) 式は Nose の方法を用いた有限温度効果を表す項である。この方法を用いて DNA 2 重らせん構造の融解、ダイナミクスと統計物理の理論が展開されている。

### (ii.2) Takeno-Homma model: base-twisting model

relevant field variable は塩基の twisting angle  $\theta_n, \theta'_n$  であり、運動方程式は以下の形をとる。

$$I\ddot{\theta}_n = J[\sin(\theta_{n+1} - \theta_n) - \sin(\theta_n - \theta_{n-1})] - h \sin(\theta_n - \theta'_n) - g \sin(\theta_n), \quad (7)$$

$$I\ddot{\theta}'_n = J[\sin(\theta'_{n+1} - \theta'_n) - \sin(\theta'_n - \theta'_{n-1})] - h \sin(\theta'_n - \theta_n) - g \sin(\theta'_n). \quad (8)$$

此処に、 $I, J, h, g$  は、それぞれ、慣性能率、stacking energy constant, hydrogen-bonding energy constant, on-site potential energy constant である [6]。キルクモード、局在モードの存在より DNA の local open state が論じられている。

蛋白生体高分子, DNA の非線形ダイナミクスに関する物理的立場からの研究は約 30 年に及ぶ歴史を持っているが、一連の研究に用いられている式はすべて上に挙げたモデル方程式か、類似の式で記述されていると言っても過言ではない。これらの式は、(7), (8) 式を除いて、何れも直線状分子に対する式であり、ラセン状高分子に対する式とはなっていない。また、考える生体高分子が絶えず外部環境の影響の下にあるという非平衡、開放系の概念が取り入れられていない。

### III. 予備的考察：準 1 次元ヘリカル格子-非線形モード-, 保存系

まず、予備的な考察として以下の Lagrangian で与えられる 3 次元線形格子

$$\tilde{L} = \sum_n \sum_{\alpha=1}^3 \frac{M}{2} \dot{u}_{\alpha,n}^2 + \sum_n \sum_{\alpha=1}^3 \frac{K_{\alpha}}{2} [(u_{\alpha,n+1} - u_{\alpha,n})^2], \quad (9)$$

を導入し、それにヘリカル変換

$$u_{1,n} = a_n \cos(cs_n) \equiv a_n \cos(\theta_n), \quad u_{2,n} = a_n \sin(cs_n) \equiv a_n \sin(\theta_n), \quad u_{3,n} = a'_n s_n = b_n \theta_n, \quad (10)$$

$$b_n = a'_n/c, \quad \text{with} \quad K_1 = K_2 \equiv K, \quad K_3 = K\mu, \quad (11)$$

を施す [8]。此処に、 $a_n, b_n$  は定数であるが、夫々、点  $n$  におけるラセンの半径、 $P_n = 2\pi b_n$  の式でラセンのピッチ  $P_n$  と関係している。ヘリカル変換を (9) 式に代入すると Euler-Lagrangian 方程式は

$$\begin{aligned} \ddot{\theta}_n = & \sum_n \frac{J}{a_n^2 + b_n^2} [a_{n+1}a_n \sin(\theta_{n+1} - \theta_n) - a_n a_{n-1} \sin(\theta_n - \theta_{n-1}) \\ & + \mu b_n (b_{n+1}\theta_{n+1} + b_{n-1}\theta_{n-1} - 2b_n\theta_n)]. \end{aligned} \quad (12)$$

となる。完全ヘリカル格子の場合、 $J = K/M, L = K/M, a_n = a, b_n = b, \lambda = a^2/b^2$  とおくと以下の式

$$\ddot{\theta}_n = \sum_n \frac{J}{1+\lambda} [\lambda \{\sin(\theta_{n+1} - \theta_n) - \sin(\theta_n - \theta_{n-1})\} + \mu(\theta_{n+1} + \theta_{n-1} - 2\theta_n)]. \quad (13)$$

が得られる。この式は 1 次元格子の式  $\ddot{\theta}_n = \sum_n J\mu(\theta_{n+1} + \theta_{n-1} - 2\theta_n)$  と対比されるべきものである。準 1 次元ヘリカル格子と通常の 1 次元格子との相違は付随するポテンシャル関数

$$v(x, \lambda, \mu) = \frac{\lambda}{1+\lambda} \{1 - \cos(x)\} + \frac{\mu}{1+\lambda} \frac{x^2}{2}, \quad (14)$$

を導入することにより理解される。その local minima は

$$\lambda \sin(x) + \mu x = 0 \quad \text{with} \quad \lambda \cos[x_0(\lambda)] + \mu > 0. \quad (15)$$

から決められる。 $x_0(\lambda)$  は  $\mu = 1$  の場合の解である。 $\lambda = 0.0$  (thick line),  $2.0$  (line),  $10.0$  (thin line) に対する  $\mu = 1$  (continuous lines) と  $\mu = 0.2$  (dotted lines) の場合のポテンシャル

ル関数  $v(x, \lambda, \mu)$  を図 2(a),  $x_0(\lambda)$  を図 2(b) に示す。直線状 1 次元格子と異なって  $v(x)$  は以下のような性質を持っている。(1)  $\lambda$  が増加するとこのポテンシャル関数全体が減少する、即ち、格子はソフト化する。(2)  $\lambda$  がある限界値を超えると  $v(x)$  には local minima が現れ、その minima の数は  $\lambda$  が増大すると step by step に増大する。(3) また、与えられた  $\lambda$  に対して  $\mu$  が小さい程系のトポロジカルな性質が増す。このことから、ヘリカル格子には以下のような固有の非線形モードが存在することが定性的に分かる。

(1) 適当な  $\lambda, 1/\mu$  の値に対して、準 1 次元ヘリカル格子には局在モードが存在する。この局在モードはヘリカル格子に於ける局所的な曲率により決められる。

(2) 同様に、適当な  $\lambda, 1/\mu$  の値に対して、準 1 次元ヘリカル格子にはキंकモード等ともっと一般的な topological な非線形モード等が存在する。

#### IV. 外部環境と接触する準 1 次元ヘリカル格子 - 現実の生体高分子の力学モデル -

ヘリカルな構造を持つ生体高分子のモデル方程式として、外部環境と接触している 1 次元ヘリカル格子方程式のモデルを考察する。

##### I. ヘリカル格子方程式の係数が lattice site $n$ によらないとした場合

まず、(13) 式に対して抵抗力と振動外力を付加した場合を取り上げる。

$$\begin{aligned} \ddot{\theta}_n = & -\gamma \dot{\theta}_n + \frac{L_1}{1+\lambda} [\lambda \{\sin(\theta_{n+1} - \theta_n) - \sin(\theta_n - \theta_{n-1})\}] \\ & + \frac{L_1}{1+\lambda} \mu [\theta_{n+1} + \theta_{n-1} - 2\theta_n] + g_n \cos(\omega_n t). \end{aligned} \quad (16)$$

$\gamma, g_n, \omega_n$  は、夫々、抵抗力の係数、ランダムな外力の振幅、振動数である。

このモデル方程式の解を調べるために先ず元の方程式 (13) の解を調べる。それには、少なくとも、以下のように局在モードの解とキंक解が存在する。

##### (a) 局在モード解

$\theta_0$  をポテンシャル関数  $V(\theta)$  の local minimum の一つとすると  $\mu\theta_0 \rightarrow 0$  as  $\theta_0 \rightarrow 2\pi\ell$  ( $\ell$ : 整数) の下で以下の asymptotic exact solution が存在する。

$$\theta(\vec{n}) = \begin{cases} \theta_0, & \text{for } \vec{n} = \vec{n}_0, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (17)$$

上記の結果の妥当性を調べるために 100 個 ( $0 \leq n \leq 99$ ) の原子から成る (11) 式で記述される 1 次元格子に対して  $L_1 = 1$  と置いて周期境界条件の下に数値計算を行った。B 型の DNA の場合に対応して  $\lambda = 1.85$  と取り、 $\mu$  の二つの場合：(a)  $\mu = 0.01$ , (b)  $\mu = 0.8$  を選び、初期条件  $\theta_{50}(t=0) = 6.3$ ,  $\theta_n(t=0) = 0$  for  $n \neq 50$  and  $\dot{\theta}_n(t=0) = 0$  for all  $n$  を設定した。数値計算の結果を図 3 に示す。図 3(a), 3(b) は夫々、厳密解に近い性質を持つ局在モード、近似解でそこでは、局在モードは ripple の発生を伴っている。

##### (b) 近似キंकモード解：

(11) 式の近似解を以下の形で探す

$$\theta_n = 2 \tan^{-1} \left[ \frac{f_n}{g_n} \right] = \frac{1}{i} \ln \left[ \frac{z_n}{z_n^*} \right] \quad \text{with} \quad z_n = g_n + if_n. \quad (18)$$

広田の方法を用いるとこの式は

$$\begin{aligned} & (z_n^*)^2 \left\{ \frac{2L_1}{1+\lambda} [\lambda P(z_n, z_n^*) + \mu Q(z_n, z_n)] \cosh_1(D_n) - D_t^2 \right\} (z_n \cdot z_n) \\ & - (z_n)^2 \left\{ \frac{2L_1}{1+\lambda} [\lambda P(z_n, z_n^*) + \mu Q(z_n^*, z_n^*)] \cosh_1(D_n) - D_t^2 \right\} (z_n^* \cdot z_n^*) = 0, \end{aligned} \quad (19)$$

with

$$\cosh_1(D_n) = \cosh(D_n) - 1. \quad (20)$$

となる。  $P(z_n, z_n^*)$  and  $Q(z_n, z_n)$  等は以下に定義される  $R(z_n, z_n), R(z_n, z_n^*)$  により

$$P(z_n, z_n) = \frac{1 + R(z_n, z_n^*)}{[1 + R(z_n, z_n)][1 + R(z_n^*, z_n^*)]}, \quad Q(z_n, z_n) = \frac{\ln [1 + R(z_n, z_n)]}{R(z_n, z_n)} \quad (21)$$

と表される。以下の漸近近似

$$P(z_n, z_n^*), Q(z_n, z_n), Q(z_n^*, z_n^*) \rightarrow 1 \text{ as } R(z_n, z_n), R(z_n^*, z_n^*), R(z_n, z_n^*) \rightarrow 0. \quad (22)$$

が用いられるとき、(21) 式は

$$\left\{ \frac{2L_1}{1+\lambda} [\lambda + \mu] \cosh_1(D_n) - D_t^2 \right\} (f_n \cdot g_n) = 0, \quad (23)$$

$$\left\{ \frac{2L_1}{1+\lambda} [\lambda + \mu] \cosh_1(D_n) - D_t^2 \right\} (f_n \cdot f_n - g_n \cdot g_n) = 0. \quad (24)$$

と解ける形になり、例えば、以下の2 - キンク解

$$\theta_n(t) = 2 \tan^{-1} [\cosh(kn - \omega t)] \equiv q(n, k, t), \quad \omega^2 = \frac{4L_1}{1+\lambda} [\lambda + \mu] \sinh^2(k/2). \quad (25)$$

$$\dot{\theta}_n(t) = 2\omega \sinh(kn - \omega t) / [1 + \cosh(kn - \omega t)]^2 \equiv p(n, k, \omega, t) \quad (26)$$

が存在する。  $k$  は定数である。この近似解の妥当性をチェックするために同じ式を初期条件  $\theta_n(t=0) = q(n, 0.6, 0), \dot{\theta}_n(t=0) = p(n, 0.6, \omega, 0)$  for  $n = 48, 49, 50, 51, 52$ , otherwise  $\theta_n(t=0) = \dot{\theta}_n(t=0) = 0$  for all  $n \neq 48, 49, 50, 51, 52$  を図4に示す。衝突を重ねながらスムーズに伝播するキンクモードは上の2 - キンク解が良い近似解であることを表している。

以上の予備的な考察の下に (16) 式に対して以下のようにパラメーターをの値を取った。

$$\lambda = 1.85, \quad \mu = 0.2, \quad \gamma = 0.1, \quad \omega = 0.1, \quad g_n = 0.01R, \quad (27)$$

### (1) 局在モード解

以下の初期の条件

$$\theta_{50}(t=0) = 6.0, \quad \theta_n(t=0) = 0 \text{ for } n \neq 50, \quad \dot{\theta}_n(t=0) = R_1 \text{ for all } n. \quad (28)$$

の場合を先ず取り上げる。此処に、  $R$  and  $R_1$  は夫々領域  $[0, 1], [-0.5, 0.5]$  にある random number である。数値計算の結果、局在モードが存在することを図5に示す。(13) 式の解である図3(a) と比べると、此処では局在モードは小さい ripple を伴っている。数値計算を更に進めると、上記のように与えられた  $\lambda, \mu, \omega, g_n$  に対して局在モードが抵抗力の係数の広範

な領域  $0.1 < \gamma < \infty$  で存在することが分かった。このことは、大きな  $\gamma$  の場合  $\ddot{\theta}_n \ll \gamma \dot{\theta}_n$  が成り立ち、(16) 式は以下の式

$$\begin{aligned} \gamma \dot{\theta}_n &= \frac{L_1}{1+\lambda} [\lambda \{\sin(\theta_{n+1} - \theta_n) - \sin(\theta_n - \theta_{n-1})\}] \\ &+ \frac{L_1}{1+\lambda} \mu [\theta_{n+1} + \theta_{n-1} - 2\theta_n] + g_n \cos(\omega_n t). \end{aligned} \quad (29)$$

に移行し、この場合にも (16) 式の場合と同じ性質を持つ局在モードの解が存在することを数値的に示すことが出来る。

## (2) キンク解

この場合、図 4 に見られる伝播するキンクモードの解は抵抗力が極めて小さい場合にのみ存在することが数値計算の結果分かった。抵抗力が増すと、その大きさの中間の領域では buckling mode 的な非線形モードが存在する (図 6)。抵抗力が非常に大きくなると、(17), (18) 式を初期条件とにして選ぶとその初期条件に相当する非線形モードがそのまま局在モードとして非常に長時間存在するというを示す。このときの解は (21) で抵抗力が大きい場合の解と一致することを示すことが出来る。

## II. ヘリカル格子の unit 間相互作用が long-range で各係数が lattice site $n$ に依存する場合

現実の生体高分子ではそのまわりの環境に応じラセン構造が局所的に変化し、また、相互作用は一般に long-range である。この場合は (9) 式を long-range interaction の場合に拡張して方程式を導き、それに抵抗力とランダムな外力を付加する必要がある。

$$\begin{aligned} \ddot{\theta}_n &= -\gamma_n \dot{\theta}_n + \sum_m \frac{K_1(n, m)}{m_n(a_n^2 + b_n^2)} [a_n a_m \sin(\theta_m - \theta_n) + \mu_{mn} b_n (b_m \theta_m - b_n \theta_n)] \\ &+ g_n \cos(\omega_n t). \end{aligned} \quad (30)$$

此処に

$$\mu_{nm} = K_3(n, m)/K_1(n, m) \quad (31)$$

また、この式の変形版

$$\gamma_n \dot{\theta}_n = \sum_m \frac{K_1(n, m)}{m_n(a_n^2 + b_n^2)} [a_n a_m \sin(\theta_m - \theta_n) + \mu_{mn} b_n (b_m \theta_m - b_n \theta_n)] + g_n \cos(\omega_n t). \quad (32)$$

も生体高分子のダイナミクスモデル方程式となり得ると期待される。

## V. DNA 生体高分子のモデル方程式

Section III 以降の此迄の議論は主に 1 本の準 1 次元構造を持つ生体高分子の場合を念頭において展開されたものである。定性的には互いにその間の結合が弱いと考えられ、3 本の helics からなる  $\alpha$ -helical protein における energy storage の問題に適用出来ると考えられる。水素結合をした塩基対から成る double helics の DNA 生体高分子の場合には、(13) 式、もっと一般的には (16) 式をこのような状況に適合するように拡張する必要がある。そのために、以下のモデル方程式を導入する。

$$\begin{aligned} I_n \ddot{\theta}_n &= -\gamma \dot{\theta}_n + J_n \sin(\theta_{n+1} - \theta_n) - J_{n-1} \sin(\theta_n - \theta_{n-1}) \\ &+ K_n (\theta_{n+1} - \theta_n) - K_{n-1} (\theta_n - \theta_{n-1}) \\ &- h_n \sin(\theta_n - \theta'_n) - \lambda_n \sin(\theta_n) - d_n \sin(\theta_n) \cos(\theta'_n) + g_n \cos(\omega_n t), \end{aligned} \quad (33)$$



$$\begin{aligned}
I'_n \ddot{\theta}'_n &= -\gamma' \dot{\theta}'_n + J'_n \sin(\theta'_{n+1} - \theta'_n) - J'_{n-1} \sin(\theta'_n - \theta'_{n-1}) \\
&+ K'_n (\theta'_{n+1} - \theta'_n) - K'_{n-1} (\theta'_n - \theta'_{n-1}) \\
&- h_n \sin(\theta'_n - \theta_n) - \lambda'_n \sin(\theta'_n) - d_n \sin(\theta'_n) \cos(\theta_n) + g'_n \cos(\omega_n t). \quad (34)
\end{aligned}$$

此処に、DNA の double strand を S, S' とし、strand S' に属する物理量には総てダッシュを付けてある。また添字  $n$  は strand を S, 或いは S' における site index である。

$\theta, I, \gamma, J$  と  $K, h, \lambda, d, g, \omega$  は、夫々、塩基の twist angle, 塩基の慣性能率、抵抗力の係数、ヘリカル格子で表される strand のなかでの塩基間の stacking energy, 塩基対の間の水素結合エネルギー係数、局所場のエネルギー定数、塩基対の双極子-双極子相互作用のエネルギーの係数、ランダムな外力の係数、その外力の振動数である。(7),(8) との相違は、係数が site-dependent になっていること、抵抗力、ランダムな振動外力が付加されているということの外に、塩基の stacking energy による項が sine-格子からヘリカル格子の場合の項となっており、また塩基対間の相互作用に双極子-双極子相互作用による項が付加されていることである。更に、状況に応じて、塩基対の周囲の原子の幾何学的配置を考慮して、twist angle  $\theta_n, \theta'_n$  がある限度を超えないことを考慮する必要がある。そのような場合、此処では (33),(34) 式の右辺に、夫々、

$\alpha_n \lambda_{1n} \sin(\alpha \theta_n) - \beta_n \lambda_{2n} \sinh(\beta \theta_n), -\alpha_n \lambda'_{1n} \sin(\alpha \theta'_n) - \beta_n \lambda'_{2n} \sinh(\beta \theta'_n)$  を付加する。 $\alpha_n, \beta_n$  等の係数は定数である。(33), (34) 式の数値解の議論については省略し、此処では、外部からの agent の接近に応じて形成されると推定される local open state が compactron-like mode の解として存在することを示す数値計算の結果を図 8 に唯一つの例を示すに止めることにする。数値計算は 50 個の塩基対から成る (33), (34) 式で記述される系に  $n = 20, \dots, 28$  の site にある塩基対に対して外部の agent の作用を初期条件として設定した場合の系の response の詳細を図 8(a), 系全体における塩基の初期条件の時間発展を図 8(b) に示す。

## VI. 生体高分子は何故ヘリカルな構造か

この研究では生体高分子 (DNA, protein 等) のヘリカルな構造とそれらの biological functioning との関連を非線形モードの観点から調べた。生体高分子のモデルとして、生体高分子それ自身が周りの環境と接触しているという状況を準 1 次元 (1d) ヘリカル格子方程式に抵抗力と揺らいでいる外力が付加されているという散逸型の 1d sine-plus-linear lattice (SLL) 方程式で表した。現実の生体高分子のダイナミクスを記述する方程式としては、この dissipative 1d SLL 方程式は非常に簡単化・単純化されたものであるが、生体高分子の構造の helicity, 生体系の散逸構造・ダイナミクス等の生体系の基本的な要素は取り入れられていると考えることが出来る。この方法・仮定の下で生体高分子の構造と biological functioning に関して以下のようなことが分かる。

(1) 生体高分子のヘリカルな構造は helicity に依存する multi-minimum ポテンシャルが付随し、topological な character を持っている。そこでは、多様なポテンシャルエネルギーの landscape が存在し、図 1(b) に見られるように各 local minimum は準安定状態として energy storage, conformational change の生体の機能の発現に導く。

(2) この energy storing は helicity と系の散逸性 (抵抗力の大きさ、揺らいでいる外力の性質) から影響を受けるが、大きな散逸性 (例えば、大きな抵抗力) に対して安定であり、その程度に応じて固有の storing が可能である。

(3) この energy storing の度合はパラメーター  $\lambda$  で表される helicity とパラメーター  $\mu$  で表されるヘリクス面に垂直な方向での unit 間の相互作用のヘリクス面内の方向の unit 間の

相互作用との比により決められる。

(4) energy storage に対応する局在モードの発生はモデル方程式の時空発展における初期条件に強く依存している。このことは、例えば生体高分子における化学エネルギーから機械的なエネルギーに変換される際の初期条件に依存してエネルギーの貯蔵に関係していると思われる。

以上本研究で用いた dissipative 1d SLL 方程式の数値計算結果から得られる主な結果は以下の通りである。生体高分子のヘリカルな構造にはその周囲の環境に応じているいる準安定状態が存在し、その周りの局在モードは生体高分子の諸機能のうち、少なくとも、energy storage, conformation の局所的な変化等に関与している。

## VI. 結論

本研究では、直線状格子から曲線状格子への変換等線形格子に幾何学的な束縛を加えると非線形格子が得られるという一般的な概念から出発して、DNA, protein 等の生体高分子は何故ヘリカルな構造をしているだろうかという基本的な問いかけに対する解答を与えることを試みた。そして、格子全体におよぶグローバルな幾何学的な束縛として最も簡単且典型的なものがヘリカル変換であることを示し、得られたヘリカル格子には localized mode, kink mode 等の固有な非線形モードが存在することを示した。一般に、生体系全体のなかにある着目する生体高分子は部分系を構成するが、このことに対して、外部環境と接触する（平衡から離れた）準 1 次元 SLL 格子を生体高分子のダイナミクスのモデル系として用いた。そして、このような散逸系においても localized mode は環境の揺らぎに対して robust に存在すること、伝播する kink mode はモデル方程式に於ける抵抗力の項が小さい場合にのみ存在し、抵抗力が段々大きくなるとそれは、buckling mode から局在モードに移行すること等を明らかにした。この観点から、局在モードがヘリカル格子、散逸ヘリカル格子における最も普遍的な非線形モードであり、それが energy storage, conformational change 等の生体の機能に関与していることを示した。

本研究においては、幾何学的束縛としてヘリカルな束縛のみを考えたが、生体内における高分子の状況に応じてもっと一般的な、また別の形の幾何学的束縛を考察する必要がある。このことは将来の研究の課題としたい。

## References.

1. A.S. Davydov, *Biology and Quantum Mechanics* (Pergamon Press, 1982) and references cited therein.
2. A.C. Scott, Physics Report **212** (1992) 1 and references cited therein.
3. S. Takeno, Prog. Theor. Physics, **73**(1985) 1985 and references cited therein.
4. M. Peyrard and A.R. Bishop, Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 2755.
5. N. Theodorakipoulos, T. Dauxois and M. Peyrard, Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 6, and references cited therein.
6. S. Homma and S. Takeno, Prog. Theor. Phys. **72** (1984) 679.
7. C.T. Zhang, Phys. Rev. **35A** (1987) 886; **40A** (1989) 2148.
8. S. Takeno, S.V. Dmitriev, P.G. Kevrekidis and A.R. Bishop, Phys. Rev. **B71** (2005) 014304.
9. S. Takeno, Phys. Lett. **A339**(2005) 352.

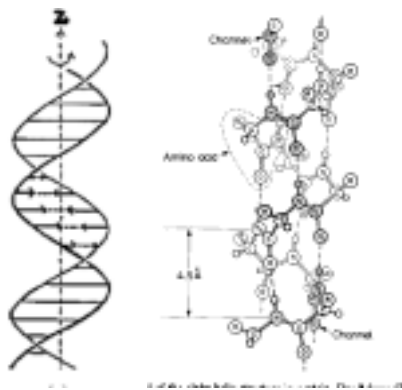


Fig.1

DNA (a), protein (b)のへリカル構造

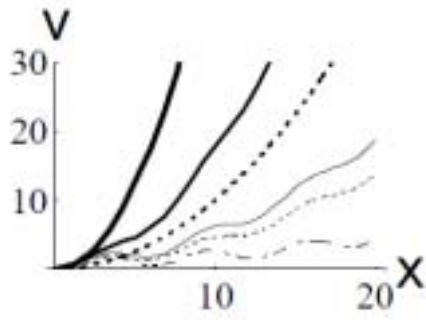


Fig.2(a)

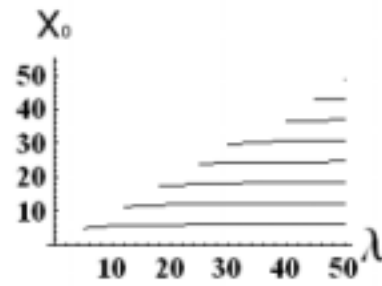


Fig.2(b)

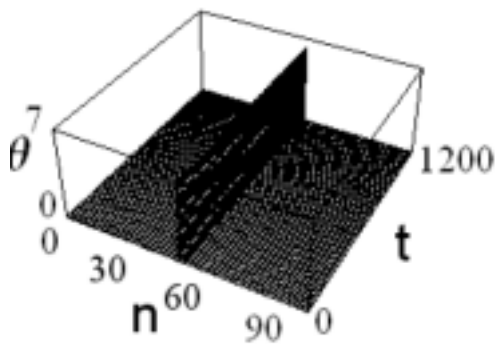


Fig.3(a)

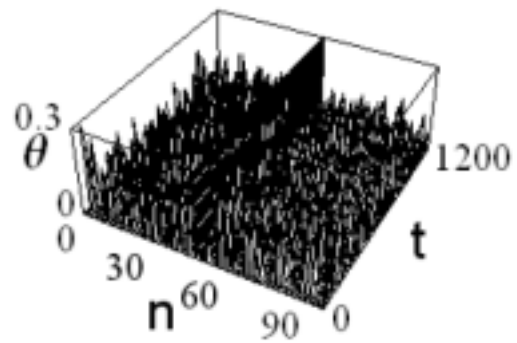


Fig.3(b)

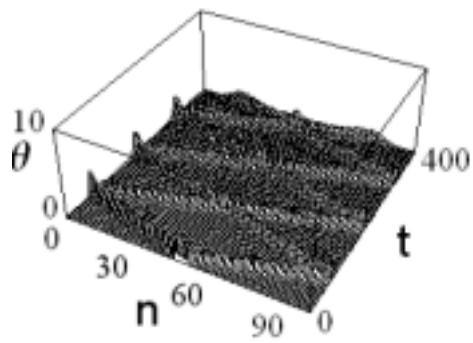


Fig.4

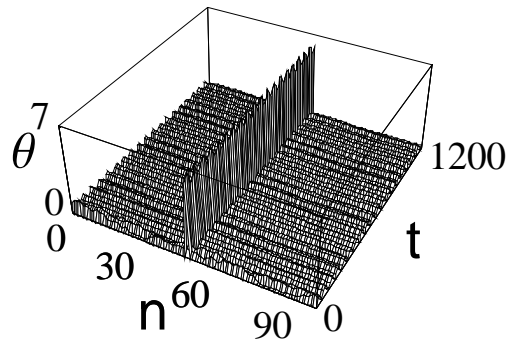


Fig.5

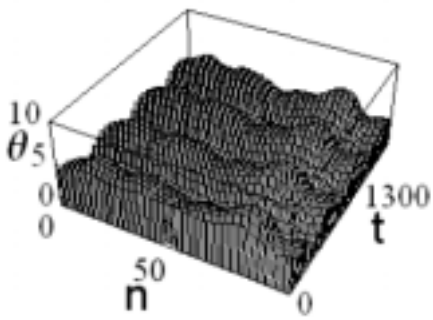


Fig.6

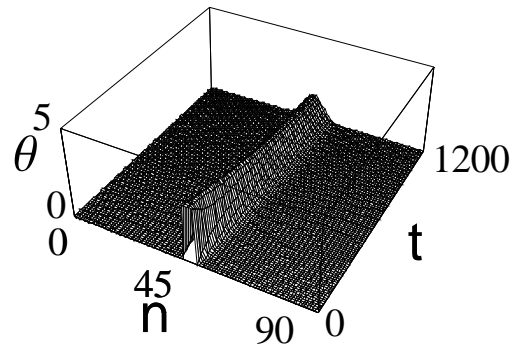


Fig.7

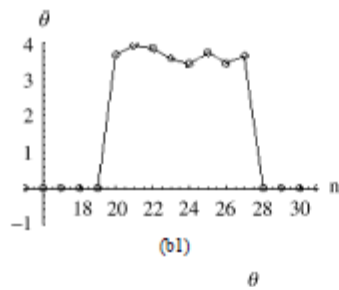


Fig.8(a)

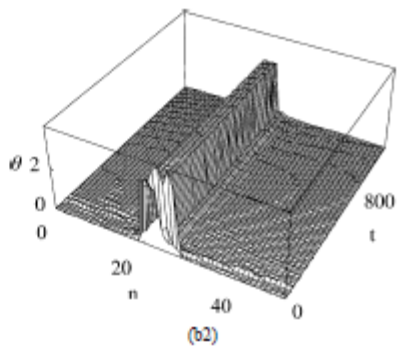


Fig.8(b)