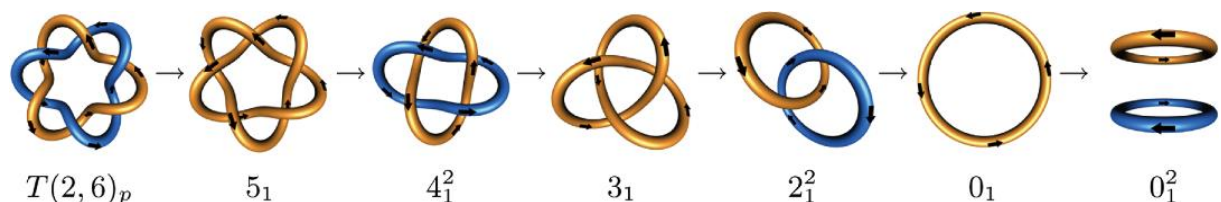


## プロジェクト名：結び目理論の DNA、タンパク質の研究への応用

プロジェクト代表者：下川 航也（理工学研究科・准教授）

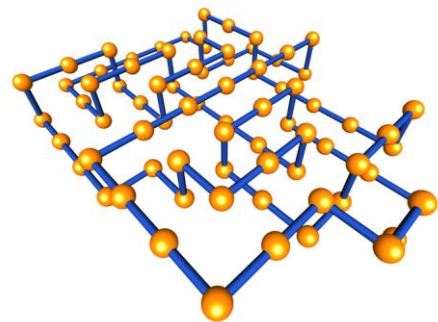
### 1 結び目理論の DNA 組み換え酵素への研究への応用

DNA 組み換え酵素である Xer は DNA のトポロジーを変えることが知られている。DNA を結び目を用いてモデル化し、組み換えをバンド手術を用いてモデル化し研究を行った。Xer に関する研究では、自明な結び目や、2m-cat と呼ばれる簡単な結び目を基質として組み換えを行い、生成物もそれほど複雑なものも観測されていない。このプロジェクトの研究では、交点数が 7 以下の結び目を対象とし、2m-cat からバンド手術によりその結び目が得られるかどうかを研究し、その存在、非存在、存在する場合のバンドの一意性を表にまとめた。この研究の一部は、2010 年 8 月に行われた国際会議において共同研究者の石原海氏より発表されている。この研究は、Xer-psi による DNA 絡み目から DNA 結び目を得る組み換えの解明、および、Xer-diff-FtsK による DNA 絡み目の絡み目解消操作の経路の解明への応用がある。Xer-diff-FtsK による結び目解消操作では、「各段階の組み換えにおいて得られる DNA のトポロジーが簡単になると仮定すると、1つの経路しか存在しない」ということを証明することが出来た。下の図は、6-cat(トーラス結び目  $T(2,6)$ ) から自明な絡み目が得られる際の経路である。これは Grainge et. al. による実験結果(EMBO J. 2007)から推察された stepwise unlinking model の数学的理論付けに当たるものである。



### 2 格子結び目の最小ステップ数の研究

タンパク質は紐状の構造であるが、近年の研究で Protein Data Bank に見られるタンパク質の 3 次構造、4 次構造において、結び目、絡み目、スリップ結び目の存在が知られている。それらの多くは、限られた長さ、限られた領域で作られている。これに対する数学的な問題は、「限られた領域内で、限られた長さで得られる結び目、絡み目の特徴付け」が挙げられる。今年度の研究では、高さがあまりない平面状の領域での格子状結び目のステップ数に関する研究を行った。平面状の領域でも任意の結び目、絡み目を実現することは出来る。しかし、平面状の領域では簡単な結び目も複雑な構造を持ち得る。



(共同研究者 R.Sharein 氏による例)

上の図は自明な結び目の 78 ステップでの実現である。今回の研究で、自明な結び目の平面状の領域内での実現で、平面状の領域内の BFACF 移動では解くことが出来ない例が無数存在することを証明することが出来た。さらに、平面状の領域内では、制限のない領域に比べて最小ステップ数が大きくなることを 10 交点以下の全ての結び目に対しシミュレーションにより確認した。特に trefoil knot の場合については、最小ステップ数が 26 であることを数学的に証明した。これは、制限のない領域の場合の 24 に比べて増加している。

これらの研究成果および関連研究を、講演などで公表した。主なものは下記の通りである。

- 2010 年 8 月に Stat24 のサテライト会議である国際会議「Statistical Physics and Topology of Polymers with Ramifications to Structure and Function of DNA and Proteins」を京都大学基礎物理学研究所において開催し、これらの研究成果を公表した。旅費をプロジェクト経費から支出している。
- 2010 年度埼玉大学連続市民講座「ひもを使って数学を」において、研究内容を紹介した。
- 日本数学会雑誌「数学」において、「DNA と結び目理論」というタイトルで DNA トポロジーの論説を書き、研究内容を紹介した。
- 2011 年 3 月の日本数学会 2011 年度年会トポロジー分科会では特別講演を依頼された。(震災のため講演は開催されず、講演アブストラクトの提出で成立。) 来年度以降に再度講演の予定。

#### 発表論文

- Kai Ishihara and Koya Shimokawa, Band surgeries between knots and links with small crossing numbers, Proceeding of the conference ``Statistical physics and topology of polymers with ramifications to structure and function of DNA and protein'' Progress of Theoretical Physics, Supplement, to appear (2011).

#### 国際会議招待講演

- On bounds for the minimum step number of knots in the simple cubic lattice,  
国際会議「Statistical physics and topology of polymers with ramifications to structure and function of DNA and protein」 2010 年 8 月 2 日-6 日, 京都大学基礎物理学研究所

#### 外部資金

- 「結び目理論の生物学への応用」、科学研究費基盤研究 (C) 22540066、2010 年度~2012 年度 (3 年間)、研究経費 3300 千円