

DNA に働く酵素の数学的研究

プロジェクト代表者: 下川 航也 (理工学研究科・准教授)

このプロジェクトでは、DNA に働く酵素である部位特異的組み換え酵素 Xer とトポイソメラーゼの働きを、結び目理論を用いて研究した。その手法は、結び目の交差交換とバンド手術であるが、特に結び目が 2 橋結び目などの場合について、数学の新しい結果を得て、それを DNA の実験結果の数学的特徴付けに応用した。さらに、DNA のモデルとして用いられる格子結び目に関して、最少ステップ数の研究を行った。

今年度は、埼玉大学のサバティカル制度を利用し、1 年間研究のみに専念することが出来た。その結果として下記の結果を得ることが出来、それぞれ論文として公表、および講演を行った。また、「DNA と結び目理論」というタイトルで論説記事を書き雑誌「数学」に発表した。さらに、昨年度行った国際会議のブローディングを editor として編集し、Progress of Theoretical Physics Supplement より発行した。

1. DNA 組み換え酵素の研究への応用

DNA 組み換え酵素の働きは、結び目のバンド手術を用いてモデル化される。まず、Xer による絡み目への作用で結び目が得られる場合の研究を行い、1997 年、2007 年の実験結果の数学的特徴付けに成功した。これは、6-cat から 7 交点結び目である 7_2 結び目、 7_4 結び目が得られる場合の特徴付け、 3_1 結び目から 2-cat が得られる場合のバンド手術の特徴付けを与えている。さらにこの結果は、現在研究を行っている Xer による絡み目解消操作 (2007 年の実験に対応) の数学的特徴付けに現れるバンド手術の特徴付けも与えるものであり、応用範囲が広い。

さらに、結び目と絡み目の間のバンド手術について、交点数が 7 交点以下の結び目とトーラス絡み目の間のバンド手術の特徴付けを行い、表にまとめた。

2. DNA トポイソメラーゼの研究

DNA に作用するトポイソメラーゼは、交差交換により効率的に DNA 結び目を解消している。どのような機構がその効率的な結び目解消を与えているかは、現在でも大きな未解決問題である。最近の研究で符号付き交差交換によるトポイソメラーゼの作用のモデル化が提唱されている。今回の研究では、符号付き交差交換が結び目解消操作になる場合の研究を、2 橋結び目の場合を中心に行った。特に、2 橋結び目について、+交差から-交差への符号付き交差交換 (および-交差から+交差への交差交換) で自明になるものの特徴付けを行った。これらの研究は、これまで知られているシミュレーションの結果の数学的背景を与えるものとなっている。

3. 格子結び目の研究

格子結び目は、DNA の組み換え酵素の研究における DNA やの形状や、タンパク質のフォールディングにおいて、モデル化する際に現れ、近年重要視されている。それらの状況では、比較的少ない数の構成物により結び目の構造が得られている場合がある。そこで問題となるのが、特定の結び目を構成する際にどれ

だけの構成物が必要となるか、という問題である。今回の研究では、slab と呼ばれる 2 平面間の間にある格子結び目の最少ステップ数の特徴付けを行った。特に、 3_1 結び目の高さ 1 の slab 内での最少ステップ数 (26 本となる) の決定を行った。また、10 交点以下の素である結び目について、slab 内の最少ステップ数の上限をシミュレーションにより与えた。

今年度のこの研究に関する成果発表、および、獲得外部資金は以下の通りである。

論文 (全て査読有り)

- Rational tangle surgery and Xer recombination on catenanes, Isabel K. Darcy, Kai Ishihara, Ram Medikonduri and Koya Shimokawa, to appear in *Algebr. Geom. Topol.* (2012) (IF 0.667)
- Bounds for the minimum step number of knots confined to slabs in the simple cubic lattice, K. Ishihara, R. Scharein, J. Arsuaga, Y. Diao, M. Vazquez and K. Shimokawa, *J. Phys. A: Math. Theor.* 45 065003 (2012) (Featured article of the issue) (IF 1.641)
- Signed unknotting number and knot chirality discrimination via strand passage, Chris Soteros, Kai Ishihara, Koya Shimokawa, Michael Szafron, and Mariel Vazquez, *Progress of Theoretical Physics Supplement* 191 78-95 (2011) (IF 2.553)
- Band surgeries between knots and links with small crossing numbers, Kai Ishihara and Koya Shimokawa, *Progress of Theoretical Physics Supplement* 191 245-255 (2011) (IF 2.553)
- DNAと結び目理論, Koya Shimokawa and Mariel Vazquez, *数学* 63 237-242 (2011)

招待講演

- Tangle analysis of site-specific recombination, Colloquium, 2012年3月16日, Department of Mathematics and Statistics, University of North Carolina at Charlotte.
- Tangle analysis of unlinking by XerCD-dif-FtsK system, International conference "Discrete and Topological Models in Molecular Biology", 2012年3月13日, University of South Florida.
- On shortest pathways of unlinking by XerCD-dif-FtsK, AMS 2012 Spring Western Section Meeting "Special Session on Knotting in Linear and Ring Polymer Models" 2012年3月3日, University of Hawaii.
- Tangle analysis of site-specific recombination, Mathematics Department Colloquium, 2011年1月4日. California State University at Chico.

獲得外部資金

- 平成22~24年度 科学研究費補助金 基盤研究(C)
「結び目理論の生物学への応用」(22540066)
計 330 万円 (平成 23 年度 110 万円)