

令和 4 年 6 月 20 日現在

機関番号：12401
研究種目：基盤研究(B) (一般)
研究期間：2016～2020
課題番号：16H03928
研究課題名(和文) 結び目理論とその諸科学への応用の研究

研究課題名(英文) Research on knot theory and its application

研究代表者

下川 航也 (Shimokawa, Koya)

埼玉大学・理工学研究科・教授

研究者番号：60312633

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,700,000円

研究成果の概要(和文)：この研究課題では、高分子、超分子などのトポロジーを結び目理論を用いて研究し成果を得た。特に、(1)染色体の立体構造を明らかにしそのトポロジーを解析し、(2)ナノチャンネルという管状の領域におけるDNAの振る舞いの研究を結び目理論を用いて行い、(3)組換え酵素がDNA絡み目を解く様子の特徴付けの研究と、その成果渦結び目の研究への応用を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

この研究では、高分子や超分子などのひも状のものが作る形を結び目理論を用いて解析し、これまで知られていなかった新たな性質を明らかにしている。この数学的なモデル化により、強力なトポロジーの解析の手段である結び目理論を様々な分野に応用することが出来、これまで無かった新しい視点をいくつかの研究分野において与えたことは学術的意義が大きいと考えられる。

研究成果の概要(英文)：In this research project, we have studied the topology of macromolecules and supramolecules using knot theory. In particular, we (1) clarified the three-dimensional structure of chromosomes and analyzed their topology, (2) studied the behavior of DNA in the tubular region of nanochannels using knot theory, and (3) characterized the way recombinases untangle DNA links and applied the results to vortex knot research.

研究分野：トポロジーとその応用

キーワード：結び目 DNA 高分子 トポロジー

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

結び目は高分子、超分子など、色々なところに現れ、様々な対象に対して結び目理論が応用されている。代表者はこれまで、DNA 組換え酵素の研究に結び目理論を応用し、酵素の働きのメカニズムを明らかにするなどの研究を行ってきた。最近では高分子のトポロジーの観測が進み、トポロジーと物性との関連も議論されている。今回の研究では、高分子のトポロジーを結び目理論を用いて研究し、トポロジー、特に結び目構造がどの様に物性・機能などに影響を及ぼすかを考察する。

2. 研究の目的

次に挙げる応用研究を念頭に、必要となる結び目理論の研究を行う。

(1) 染色体トポロジーの研究

2009 年の Science の論文において、結び目を含まない染色体の立体構造のモデルが提唱された。その後、2016 年頃には染色体に結び目が見つかり、染色体における結び目の構造の意義が問題となっている。また最近では精密な Hi-C データも得られており、そのデータからエラーを少なく立体構造を与えるアルゴリズムが必要となっている。この研究では、そのアルゴリズムを与え、それを実際の染色体の実験データに適用し、染色体の立体構造を明らかにする。

(2) 格子結び目と高分子ポリマーのモデル化

格子結び目について、これまで制限の無い領域、および、スラブ状領域(高さのみ制限された領域)において、最少ステップ数の研究、BFACF 移動に関するエルゴード類の特徴付けなどの研究を行ってきた。その研究を進め、チューブ状領域での格子結び目・絡み目の議論を行う。チューブ状領域内の格子結び目は、ナノチャンネル内の DNA のモデルとして用いられており、その特徴付けは重要な課題であるため、その研究を推進する。

(3) DNA 組換えの研究

Xer による DNA 絡み目解消操作に関して、組換え毎にトポロジーが簡単になる(交点数が下がる)場合の特徴付けを 2013 年の PNAS の論文において行っている。この条件を緩めた場合の絡み目解消経路の研究を行う。

(4) 3 次元多様体のハンドル体分解とネットワーク

絡み合うネットワークの構造は、結晶構造、超分子の構造等で観測されているが、その数学的特徴付けと分類はあまり進んでいない。この研究では 3 次元トポロジーを用いて、絡み合うネットワークの研究の基礎付けをし、化学的構造の特徴付けに応用する。

(5) 欠陥線が作る結び目の研究

ネマチック液晶にコロイド粒子を入れた際に、その周りに欠陥線として結び目・絡み目が現れることが知られている。この結び目・絡み目の特徴付けを行う。

3. 研究の方法

上記に挙げたそれぞれの項目について、その方法を記述する。

(1) 染色体のトポロジーについては、distance geometry の議論を用いて、立体構造を明らかにする。Hi-C データのヒートマップの情報から、結び目のトポロジーの情報を得る方法を与える。

(2) 立方格子内のチューブ状領域において結び目・絡み目の構成方法を特徴付けることにより、得られる結び目・絡み目を特徴付ける。各種格子における格子結び目の最少ステップ数の研究を行う。

(3) 組換え後に交点数が下がらない場合にも、結び目不変量を用いることにより、組換えで得られる DNA のトポロジーには制限が付く。(2,2p)-トーラス絡み目の絡み目解消経路について、その特徴付けの研究を行う。

(4) 絡み合うネットワーク構造は、3 次元トーラスのハンドル体分解が対応する。その対応をもちいて、絡み合うネットワークの分類、標準形の決定を行う。

(4) 渦結び目が近年実際に構成され、繋ぎ換え(reconnection)によるそのトポロジーの変化が議論されている。渦結び目・絡み目の繋ぎ換えは、DNA 結び目・絡み目の組換えと同様の方法でモデル化されるため、その手法を応用する。

4. 研究成果

(1) 染色体トポロジーの研究成果

Distance geometry を持ちて、新たなアルゴリズムを与え、Hi-C データから立体構造を得る

場合のエラーの評価の研究を行った。その成果を実際のデータに適用し、これまで知られている他のアルゴリズムとの差を評価している。この成果は現在論文としてまとめ、今後発表予定である。

(2) 格子結び目の研究成果

チューブ状領域内に実現可能な格子絡み目の特徴付けを行った。特に、trunk と呼ばれる絡み目の不変量を用いて、与えられたチューブ状領域で格子絡み目として実現可能であることの必要十分条件を与えた。また、結び目・絡み目が実現可能な最小のチューブ状領域 2×1 -チューブに埋め込まれる分結び目・分離不能絡み目は、2 橋結び目・絡み目、および、それらの連結和となる。 2×1 -チューブの 2 橋結び目・絡み目については、その最少ステップ数の決定アルゴリズムを与え、具体的にその値を求めた。 2×1 -チューブ以外の領域では、最少ステップ数の決定は非常に難しい問題であり、いくつかの結果しか知られていない。 2×1 -チューブの場合には、2 橋結び目・絡み目を与えれば原理的に最少ステップ数を決定できるものであり、状況は大きく異なるものとなった。また、チューブ状領域における結び目の局所化に関する成果を得た。

(3) DNA 組換え酵素の研究成果、渦結び目の研究成果

結び目理論、3 次元トポロジーの研究を行い、その成果を、染色体のトポロジー、DNA 組換え、高分子ポリマーの研究へ応用するものである。DNA 組換えの研究について、Xer-dif-FtsK システムによる DNA 絡み目解消経路に関する論文を発表した。これは、トーラス絡み目 $T(2,6)$ から 6 回の組換えで絡み目が解かれる状況を、各段階で交点数が上がらないとの仮定の下、完全にその経路を決定したものである。この研究は、DNA 組換え酵素の研究として発表した後、その後、同様の絡み目解消が、渦結び目、絡み目の reconnect ion (繋ぎ換え) でも観察され、その分野でも多く引用されている。特に、渦結び目のヘリシティとの関連研究において、重要視されている。

また、トポロジーと高分子に関する国際会議として、2017 年 8 月 8 日-10 日にお茶の水女子大学において、「Knots and Polymers: Aspects of topological entanglement in DNA, proteins and graph-shaped polymers」を開催し、著名海外研究者を招待し講演して頂いた (講演者数 20 名 (海外講演者 10 名) 参加者 44 名) 。このワークショップのプロシーディングは、雑誌 Reactive and Functional Polymers (Elsevier 社から出版予定である。また、Encounter with Mathematics、および、東北結び目セミナーの開催を援助し、研究討論を行った。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 11件 / うち国際共著 5件 / うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Ishikawa Masaharu, Mattman Thomas, Namiki Kazuya, Shimokawa Koya	4. 巻 760
2. 論文標題 Alternating knots with large boundary slope diameter	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Contemporary Mathematics	6. 最初と最後の頁 207 ~ 216
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1090/conm/760/15292	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Sawada Tomohisa, Inomata Yuuki, Shimokawa Koya, Fujita Makoto	4. 巻 10
2. 論文標題 A metal-peptide capsule by multiple ring threading	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 5687
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-019-13594-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Ishihara Kai, Koda Yuya, Ozawa Makoto, Shimokawa Koya	4. 巻 257
2. 論文標題 Neighborhood equivalence for multibranching surfaces in 3-manifolds	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Topology and its Applications	6. 最初と最後の頁 11 ~ 21
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.topol.2019.02.005	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Beaton N. R., Eng J. W., Ishihara K., Shimokawa K., Soteros C. E.	4. 巻 14
2. 論文標題 Characterising knotting properties of polymers in nanochannels	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Soft Matter	6. 最初と最後の頁 5775 ~ 5785
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8sm00734a	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Ishihara Kai, Pouokam Maxime, Suzuki Atsumi, Scharein Robert, Vazquez Mariel, Arsuaga Javier, Shimokawa Koya	4. 巻 50
2. 論文標題 Bounds for minimum step number of knots confined to tubes in the simple cubic lattice	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical	6. 最初と最後の頁 215601 ~ 215601
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1751-8121/aa6a4f	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Stolz Robert, Yoshida Masaaki, Brasher Reuben, Flanner Michelle, Ishihara Kai, Sherratt David J., Shimokawa Koya, Vazquez Mariel	4. 巻 7
2. 論文標題 Pathways of DNA unlinking: A story of stepwise simplification	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 12420
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-017-12172-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Dorothy Buck, Kai Ishihara, Matt Rathbun, and Koya Shimokawa	4. 巻 94(2)
2. 論文標題 Band surgeries and crossing changes between fibered links	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 J. London Math. Soc.	6. 最初と最後の頁 557-582
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1112/jlms/jdw049	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Makoto Ozawa and Koya Shimokawa	4. 巻 XVII
2. 論文標題 Dehn surgery and Seifert surface system	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Ann. Sc. Norm. Super. Pisa Cl. Sci. (5)	6. 最初と最後の頁 267-276
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2422/2036-2145.201410_008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yeonhee Jang, Tsuyoshi Kobayashi, Makoto Ozawa, Kazuto Takao	4. 巻 93(2)
2. 論文標題 A knot with destabilized bridge spheres of arbitrarily high bridge number	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 J. London Math. Soc.	6. 最初と最後の頁 379-396
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1112/jlms/jdw004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yuya Koda, Makoto Ozawa	4. 巻 282
2. 論文標題 Knot homotopy in subspaces of the 3-sphere	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Pacific J. Mathematics	6. 最初と最後の頁 389-414
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2140/pjm.2016.282.389	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kazufumi Eto, Shosaku Matsuzaki, Makoto Ozawa	4. 巻 198
2. 論文標題 An obstruction to embedding 2-dimensional complexes into the 3-sphere	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Topology and its Applications	6. 最初と最後の頁 117-125
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.topol.2015.11.008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計10件 (うち招待講演 10件 / うち国際学会 6件)

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 Untying pathways of vortex knots
3. 学会等名 ヘリシティと時空対称性、古典場から量子場まで (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 3-dimensional topology and polycontinuous pattern
3. 学会等名 International Symposium “Polymers and networks via topology and entanglement” (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 3-dimensional topology and poly-continuous pattern
3. 学会等名 MATERIALS RESEARCH MEETING 2019, Mathematical Materials Science -Mathematical Approaches for Materials Designs in the Data Driven Society- (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 Handlebody decomposition of 3-manifolds and their application
3. 学会等名 可微分写像の特異点論とその応用(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 下川航也
2. 発表標題 トポロジーと高分子科学
3. 学会等名 2019年度年会企画特別講演(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 下川航也
2. 発表標題 結び目理論の高分子科学への応用 -- DNA組換え酵素、高分子化学、材料科学、統計力学的エントロピー--、
3. 学会等名 名古屋大学多元数理科学研究科談話会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 On chirality of molecular graphs
3. 学会等名 Cyclic & Topologically Complex Polymers, Spring 2018 American Chemical Society Meeting（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 Lattice knots and links confined in tube regions
3. 学会等名 Conference on Means, Methods and Results in the Statistical Mechanics of Polymeric Systems II, Fields Institute, University of Toronto, Canada（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 下川航也
2. 発表標題 結び目理論の応用について -DNA 組換え酵素、高分子化学、統計力学的エントロピー-
3. 学会等名 第63 回トポロジーシンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 下川航也
2. 発表標題 トポロジーの高分子化学への応用
3. 学会等名 ナノ学会主催 ナノ構造・物性- ナノ機能・応用部会 合同シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2016年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 Shimokawa, Koya, Ishihara, Kai, Tezuka, Yasuyuki	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Springer, SpringerBriefs in the Mathematics of Materials	5. 総ページ数 89
3. 書名 Topology of Polymers	

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>下川研究室ホームページ https://www-p.sci.ocha.ac.jp/shimokawa-lab/</p> <p>International Workshop on Spatial Graphs 2016 http://www.f.waseda.jp/taniyama/SG2016/SG2016.html</p>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	河内 明夫 (Kawauchi Akio) (00112524)	大阪市立大学・大学院理学研究科・特任教授 (24402)	

6. 研究組織 (つづき)

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	石原 海 (Ishihara Kai) (40634762)	山口大学・教育学部・准教授 (15501)	
研究分担者	小沢 誠 (Ozawa Makoto) (50308160)	駒澤大学・総合教育研究部・教授 (32617)	
研究分担者	三松 佳彦 (Mitsumatsu Yoshihiko) (70190725)	中央大学・理工学部・教授 (32641)	
研究分担者	門上 晃久 (Kadokami Teruhisa) (80382026)	金沢大学・機械工学系・教授 (13301)	
研究分担者	山口 祥司 (Yamaguchi Yoshikazu) (30534044)	秋田大学・教育文化学部・准教授 (11401)	
研究分担者	谷山 公規 (Taniyama Kouki) (10247207)	早稲田大学・教育・総合科学学術院・教授 (32689)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計6件

国際研究集会 国際シンポジウム "Polymers and networks via topology and entanglement"	開催年 2019年～2019年
国際研究集会 国際ワークショップ "The Topology of Nucleic Acids: Research at the Interface of Low-Dimensional Topology, Polymer Physics and Molecular Biology" (19w5226)	開催年 2019年～2019年
国際研究集会 国際シンポジウム "Polymers meet Topology"	開催年 2019年～2019年

国際研究集会 国際ワークショップ Knots and Polymers: Aspects of topological entanglement in DNA, proteins and graph-shaped polymers	開催年 2017年～2017年
国際研究集会 国際ワークショップ Topology and graphs in polymer chemistry	開催年 2016年～2016年
国際研究集会 International Workshop on Spatial Graphs 2016	開催年 2016年～2016年

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
米国	University of California, Davis			
カナダ	University of Saskatchewan			