

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 1 日現在

機関番号：15501

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2016

課題番号：26800081

研究課題名(和文) 結び目理論を応用した高分子トポロジーの研究

研究課題名(英文) Research on polymer topology via knot theory

研究代表者

石原 海 (Ishihara, Kai)

山口大学・教育学部・講師

研究者番号：40634762

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：DNAやそれに働く酵素などの高分子トポロジーの研究に応用するために、絡み目のバンド手術や交差交換、格子結び目の研究を行った。本研究では、主に次に挙げる成果を得た。まず、2つの絡み目の間のバンド手術による最短経路について調べ、7交点以下の結び目と6交点以下の2成分絡み目それぞれについて最短経路の具体例を与えた。また、一般には経路が多様であることを示した。次に、ファイバー絡み目同士の間での1回のバンド手術や交差交換について、特徴付けを与えた。この結果を利用し、具体例に対してバンド手術が決定された。さらに、制限された領域における格子結び目の特徴付けなどの結果を得た。

研究成果の概要(英文)：For application to studies of topology of polymers such as DNA and enzyme, we studied band surgeries and crossing changes on links, and studied lattice knots. In this project, we obtained the following results. First, we gave concrete pathways by band surgeries for each knot up to 7 crossings and each 2-component link up to 6 crossings. Also we showed that the pathways have diversity in general. Next, we gave a characterization for a single band surgery or a single crossing change between two fibered links. Some examples of band surgeries are determined by applying this result. Finally, we characterized lattice knots in a confined region.

研究分野：低次元トポロジー

キーワード：DNA結び目 バンド手術 交差交換 格子結び目

1. 研究開始当初の背景

細菌やウイルスなどの比較的短いDNAのほとんどが環状になっており、結び目や絡み目の構造を持っている。近年、結び目理論がDNAやタンパク質の研究に盛んに応用されている。具体的には、結び目のデーモン手術の結果がDNA組換えの特徴付けに応用されたり、結び目の長さの研究がDNAやタンパク質の立体構造の研究に応用されたりしている。

(1) DNAに作用する酵素のなかにはDNAの空間的構造を変えるものがある。トポイソメラーゼや部位特異的組換え酵素がその代表的例であり、転写、複製、修復、ウイルスDNAの挿入などの際に重要な役割を果たしている。そこで、これらの酵素の作用を有理タングル手術、特にバンド手術や交差交換でモデル化しそのメカニズムを解明することが求められている。細胞分裂の際に問題となる絡みは、通常トポイソメラーゼによって交差交換され解消されている。ところがトポイソメラーゼが存在しない中でも、部位特異的組換え酵素Xerがトーラス絡み目 $T(2,p)$ 型のDNA絡み目を解消することが知られている。このとき、 $T(2,p), T(2,p-1), \dots, T(2,3), T(2,2), T(2,1), T(2,0)$ と段階的に解いているのではないかと推測される。これを段階的絡み目解消モデルという。このモデルの各ステップにおけるXerの作用を特徴づけることや他の経路の可能性を考察することが課題となっていた。

(2) 環状高分子を考える上でのモデルとして3次元格子上的な結び目、格子結び目を考えることができる。格子結び目の取り得る形を考察することにより、環状高分子の構造や性質に特徴づけを与えることが課題となっていた。

2. 研究の目的

(1) バンド手術や交差交換の研究を行い、DNAに作用する酵素の研究に応用することが1つの目的である。例えば、繰り返しおこる部位特異的組換えにおいて、最短の経路や

その長さについて、部位特異的組換えをバンド手術でモデル化することによって研究を行う。また、1回のバンド手術や交差交換の特徴付けを行い、部位特異的組換えやトポイソメラーゼのDNAへの作用の研究に応用する。

(2) 結び目を格子結び目で構成するのに必要な長さ(最小ステップ数)を考えることは、「与えられた結び目や絡み目をDNAやタンパク質等で構成するのに、塩基対やアミノ酸といった構成要素がどれだけ必要となるか」という問題を考えることになる。また、格子結び目の形を研究することは高分子の構造の数学的特徴付けにつながる。したがって、格子結び目を調べることによってDNAやタンパク質などの幾何的構造を研究することがもう1つの目的である。

3. 研究の方法

(1) ①バンド手術の具体的な例をできる限り多く見つけた。また、経路の長さを評価するために符号数、ジョーンズ多項式の特値、 Q 多項式の特値などの不変量を比較した。②段階的絡み目解消モデルに登場する $(2,p)$ トーラス絡み目 $T(2,p)$ から $(2,p-1)$ トーラス絡み目 $T(2,p-1)$ への部位特異的組換えを特徴づけるために、ファイバー絡み目からファイバー絡み目に限ってバンド手術や交差交換を調べた。具体的には、ファイバー曲面を弧に沿って切ってできる曲面や弧に沿って捻った曲面が、またファイバー曲面になるのはどんな場合か調べた。

(2) ①高さと幅を制限された領域(チューブ)で格子結び目がどんな形を取り得るかについて調べた。チューブ内に組み紐を具体的に構成した。

②チューブの中の格子結び目に対して、結び目解消操作などの交差交換やバンド手術を調べた。

4. 研究成果

(1) ①2つの絡み目がバンド手術によって移り合うとき、その最短経路やどんな絡み目を經由できるかについて研究を行った。その結果として7交点以下の結び目と6交点以下の2成分絡み目に対して、最短経路の長さや經由できる絡み目の例を与えた。この成果は、今まで実験で得られていた幾つかの部位特異的組換えを特徴づけるだけでなく、今後の実験結果に対しても特徴付けの可能性を持っている。(2,p)トーラス絡み目の絡み目解消において、既に絡み目解消の最短経路が一意的であることが、各ステップで絡み目の交点数が減るという条件のもとで示されている。この条件を緩め、各ステップで絡み目の交点数が増えないとし、 $T(2,6)$ を起点とした場合の最短経路を全て決定しまとめた。このように、ある条件のもとでバンド手術による経路を決定したが、一方で条件なしではバンド手術による経路が多様であることも示している。例えば、2つの成分数が同じ絡み目の間に、経路として1つ絡み目が存在すれば、無限個の経路が存在する事を示した。このことから、一般に部位特異的組換えをバンド手術でモデル化して、長さ2以上の経路を数学的に決定する際に、何らかの条件が必要となることがわかった。

②2つのファイバー絡み目の間のバンド手術や交差交換について研究を行った。その結果オイラー標数の差が1であるバンド手術が一般化ホップバンディングであることを示した。また、オイラー標数が等しいとき交差交換についても特徴づけを与えた。これらの結果を幾つかの具体例に応用することにより、バンド手術の一意性を示した。特に、段階的絡み目解消モデルに登場する(2,p)トーラス絡み目 $T(2,p)$ から(2,p-1)トーラス絡み目 $T(2,p-1)$ への X_{er} の働きを特徴づけることができた。今後、部位特異的組換えの特徴付けへの応用を見据えた、さらなる研究の発展が

期待される。また、数学においても多様体のデーモン手術やオープンブック分解などの研究への応用も期待される。

(2) ①チューブに入る格子結び目が取り得る形の研究を行った。結び目がある大きさのチューブに格子結び目として入ることと **trunk** と呼ばれる不変量がチューブの大きさに制限されることが必要十分であることを示した。これによりどんな大きさのチューブに対しても、そこに格子結び目として入らない結び目が無限個存在することが示された。また、(2×1)チューブに入る2橋結び目に対して、最小ステップ数を決定するアルゴリズムを与え、実際10交点以下の2橋結び目に対して最小ステップ数を決定した。特に、(2×1)チューブ内の格子結び目の最小ステップ数に対して、交点数の1次式による上界と下界をそれぞれ与えた。

②(2×1)チューブ内の格子結び目の結び目解消操作やバンド手術に関する研究を行った。この研究では、(2×1)チューブ内の格子結び目において、結び目解消操作など、特定の交差交換やバンド手術が有限領域で実現可能である事を示している。また、このことを用いて、(2×1)チューブ内の格子結び目の指数関数的増加率が自明な結び目と一致することを得ている。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 3件)

① Kai Ishihara, Maxime Pouokam, Atsumi Suzuki, Robert Scharein, Mariel Vazquez, Javier Arsuaga, Koya Shimokawa, Bounds for minimum step number of knots confined to tubes in the simple cubic lattice, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 査読有、50巻21号、2017、1-28

② Dorothy Buck、Kai Ishihara、Matt Rathbun、Koya Shimokawa、Band surgeries and crossing changes between fibered links、Journal of the London Mathematical Society、査読有、94 巻(2)、2015、557-582

BUCK, Dorothy
RATHBUN, Matthew
VAZQUEZ, Mariel
ARUSUAGA, Javier
SOTEROS, Chris

③ Dorothy Buck、Kai Ishihara、On coherent band pathways between knots and links、Journal of Knot Theory and Its Ramifications、査読有、24巻、2014、1-21

〔学会発表〕(計 3 件)

① 石原 海、The nomenclature of graphs and its application in polymer chemistry、国際研究集会 Topology and graphs in polymer chemistry、2016.8.6、東京工業大学(東京都目黒区)

② 石原 海、DNA の部位特異的組換えと絡み目のバンド手術、生命ダイナミクスの数理とその応用、2016.7.28、東京大学玉原国際セミナーハウス(群馬県沼田市)

③ 石原 海、Unknotting operation of 2-bridge knots and lattice polygon in tube, 8th Australia New Zealand Mathematics Convention, 2014.12.12、メルボルン(オーストラリア)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

石原 海 (ISHIHARA, Kai)
山口大学・教育学部・講師
研究者番号：40634762

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし

(4) 研究協力者

下川 航也 (SHIMOKAWA, Koya)