§

Let $\gamma(s):[0,l]\to R^3$ be a curve，where s is the arc length。

$\overrightarrow{e_1}=\dfrac{\partial\gamma}{\partial s}$ ，$\overrightarrow{e_2}$ is the principal mormal and $\overrightarrow{e_3}$ is the binormal。

We have the Frenet-Serret formula：

$$\frac{d}{ds}\begin{pmatrix}t\\n\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&\kappa&0\\-\kappa&0&\tau\\0&-\tau&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}t\\n\\b\end{pmatrix}\quad\text{where}\quad t=\overrightarrow{e_1},n=\overrightarrow{e_2},b=\overrightarrow{e_3}$$

$\gamma(s)$沿$\overrightarrow{e_2}$的方向作變分$\gamma(s,u)=\gamma(s)+f(s)\overrightarrow{e_2}$ with $\gamma(s,0)=\gamma(s)$

$$\frac{\partial\overrightarrow{e_1}}{\partial s}(u,s)=\alpha(u)f(s)\vec{v}(u,s)\quad\text{where}\quad\vec{v}=\cos\psi\overrightarrow{e_2}+\sin\psi\overrightarrow{e_3}$$

取 u 使得$\alpha(u)=1$ 則$\dfrac{\partial\overrightarrow{e_1}}{\partial s}(u,s)=f(s)\vec{v}(u,s)$

$\dfrac{d\sigma}{ds}=\kappa$ ，$k=\kappa_g=\dfrac{\tau}{\kappa}$

把變分移轉到S^2上

$$\begin{cases}d\vec{t}=\vec{n}d\sigma+(f\cos\psi\vec{n}+f\sin\psi\vec{b})du\\ d\vec{n}=(-\vec{t}+k\vec{b})d\sigma+(-f\cos\psi\vec{t}+v\vec{b})du\\ d\vec{b}=-k\vec{n}d\sigma+(-f\sin\psi\vec{t}-v\vec{n})du\end{cases}$$

沿 u 方向的 Frenet-Serret 公式是，一個 Darboux matrix

$$\Omega_u=\begin{pmatrix}0&f\cos\psi&f\sin\psi\\-f\cos\psi&0&v\\-f\sin\psi&-v&0\end{pmatrix}\quad,\quad\frac{\partial}{\partial u}\begin{pmatrix}\vec{t}\\\vec{n}\\\vec{b}\end{pmatrix}=\Omega_u\begin{pmatrix}\vec{t}\\\vec{n}\\\vec{b}\end{pmatrix}$$

其中Ω_u的係數對應角速度向量$\overrightarrow{\Omega_u}=v\vec{t}-f\sin\psi\vec{n}+f\cos\psi\vec{b}$ ，滿足$\dfrac{\partial\overrightarrow{e_i}}{\partial u}=\overrightarrow{\Omega_u}\times\overrightarrow{e_i}$

若(1)$\psi=0$ (彎曲完全沿$\overrightarrow{e_2}$) (2) $v=\tau$ (標準撓率) (3) u 為弧長參數($\left\|\dfrac{\partial\vec{t}}{\partial u}\right\|=f=k$)

則公式退化為標準 Frenet-Serret 公式。

$$\begin{cases} k = -\psi_\sigma + \dfrac{f_\sigma}{f}\cot\psi \\ v = f_\sigma \csc\psi \\ 0 = -k_u + w_\sigma + f\sin\psi \end{cases}$$

$$[\psi_\sigma - \frac{f_\sigma}{f}\cot\psi]_u + [f_\sigma \csc\psi]_\sigma + f\sin\psi = 0$$

若假設 f is a constant，則$\psi_{\sigma u} + f\sin\psi = 0$ 得到一個 sine-Gordon 方程。

An antikinks：

$$\psi(\sigma,u) = 4\arctan[\exp(\sqrt{f}(au - \frac{\sigma}{a} + b))]$$

在蛋白質摺疊的物理意義：

1. $\overline{e_1}$：蛋白質主鏈切向方向
2. 沿 u 的變化：描述主鏈局部幾何的演化。例 α-螺旋，β-摺疊。
3. 參數含意
   (1) f：主鏈彎曲程度
   (2) ψ：彎曲方向的偏好
   (3) v：主鏈扭轉的速率

§ 扭轉變換算子(twisting operator)

$\mathrm{T} := K\dfrac{\partial}{\partial\sigma} + W\dfrac{\partial}{\partial u}$ $\vec{n} - \vec{b}$ 法平面的無窮小旋轉生成元。

再標架作標下，$K = \begin{pmatrix} 0 & -\kappa & 0 \\ \kappa & 0 & -v \\ 0 & v & 0 \end{pmatrix}$表示扭轉密度張量

$W = \begin{pmatrix} 0 & -f\cos\psi & -f\sin\psi \\ f\cos\psi & 0 & 0 \\ f\sin\psi & 0 & 0 \end{pmatrix}$表示彎曲-扭轉偶和張量

其形式確保變形滿足 SO(3)群表示(保持標架正交性)。

T 控制摺疊過程中主鏈扭轉形變：

1. twist propagation
2. bend-twist coupling
3. solitonic solution

   $\mathrm{T}\overline{e_i} = \lambda_i \overline{e_1}$ 導出一類 sine-Gordon solitonic solution $K(u,\sigma) = K_0\,\mathrm{sech}(\dfrac{u - c\sigma}{\zeta})$

其中 c 是摺疊前沿的傳播速度。ζ 是紐結寬度(約 1nm，對應 3-4 個殘基)
實驗結果：