

繊維状蛋白質の立体構造を研究する  
ための Basic 言語によるパーソナル・  
コンピューター用基本ソフトの作成

武 田 泰 宏

## Summary

### Personal Computer Programs to Study the Conformation in Fibrous Proteins

Yasuhiro Takeda

Personal computer programs coded in BASIC have been newly developed to study the geometrical structure of fibrous proteins, which perform the transformation of conformation angles or helical parameters in polypeptides to the Cartesian atomic coordinates, and its reverse. By means of this, the atomic coordinates for a residue in a right-handed  $\omega$ -helix were computed as an example, corresponding to the given helical parameters.

これは合成蛋白質の右巻き  $\omega$ -ラセン構造の安定化要因である分子間相互作用を詳しく考察する目的で、この2年間(1991-1993)に行ったコンピューター・ソフトの開発などを含む研究経過の中間報告である。

合成ポリペプチドや繊維状蛋白質などの立体構造を研究する場合、いわゆる“wire model”の分子模型の組立てが不可欠であるが、立体障害や水素結合の形成、赤外二色比など物理化学的測定値との適合性などの観点から分子模型の良悪や妥当性を検討する場合、計算機に基づいたもう少し信頼できる精確な分子モデルの原子座標が必要になる<sup>1-3)</sup>。これは高分子の立体構造が低分子物質に関する蓄積された構造データから抽出された標準的知識と矛盾しないためにも必要なことである。この作業は計算機の中で高分子の主鎖、側鎖に関する内部回転角を変数にして最適値を求めこれらを原子座標に変換することにより行うが、これを Basic 言語によるパーソナル・コンピューター用ソフトを用いて行えば、経費がかからず短時間に自由にモデルビルディングなどの試行や分子モデルの細部のチェックが可能になり、大変便利であると思われる。例えば、日立のパソコン MB16001 を用いると、内部回転角を変数にした  $\omega$ -ラセンの分子モデルはその場で、1つ当たり10秒たらずで計算することが可能である。また蛋白質分子の局所的相互作用の様相や分子間相互作用などに着目して検討する場合にも、より信頼できる原子座標に基づいた作図を併用しこれを逐次的に修正していくやり方が矛盾を克服する上で無難と思われる。このような目的で作成した基本ソフト 1~3 の内容を以下に簡単に説明する。

#### 1. 内部回転角の原子座標への変換 (COR)

共有結合で結ばれた原子 1, 2, 3 の直交座標系での座標が与えられている場合、原子 4 について図 1 の結合長 R2, 結合角 PH, 結合軸 2-3 に関する内部回転角 TU を入力すると、これを原子 4 の直交座標 (又は円筒座標) に変換する。内部回転角の符号は結合軸 2-3 に沿って見た場合、眼より遠方側にある結合軸 3-4 が結合軸 1-2 に対して時計回りに回転する方向を正とする。

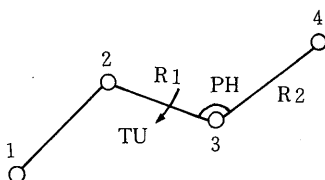


図 1

#### 2. 直交座標の内部回転角への変換 (IRA)

1 のソフトを用いた演算の逆過程を計算する。原子 1, 2, 3, 4 の直交座標を入力すると結合軸 2-3 に関する内部回転角を算出する。

#### 3. ラセン状ポリペプチド鎖の内部回転角とラセン定数を関係づける宮沢の式 (HLC)<sup>4)</sup>

蛋白質分子の主鎖である  $N-C_\alpha$ ,  $C_\alpha-C'$ ,  $C'-N$  結合軸に関する 3 つの内部回転角  $\phi$ ,  $\psi$ ,  $\omega$  とペプチド基に関する標準的な結合長と結合角を入力するとラセン定数である残基並進距離  $p$  と残基当り回転角  $\theta$  を計算する。目的のラセン定数に一致するコンフォメーション角を探した上、これより  $C_\alpha$  原子を直交座標又は円筒座標の  $x$  軸上に置いた時の他の主鎖原子の座標を計算し印刷する。

これらのプログラム・ソフトを使って計算した例として右巻き  $\omega$ -ラセン ( $p=1.325\text{\AA}$ ,  $\theta=90.0^\circ$ ) の原子座標 (円筒座標) を表 1 に示した。

この他、赤外線吸収の二色比の測定より求められるアミド基や側鎖原子団の特性吸収帯の遷移モーメントの方向 (ラセン軸とのなす角) について、内部回転角を変数にして計算した分子モデルに基づいて推定される値を算出するソフトも作成した。

表 1 右巻き  $\omega$ -ラセンの原子座標

	$r(\text{\AA})$	$\phi(^{\circ})$	$z(\text{\AA})$
$C_\alpha$	2.517	0.00	0.000
$C'$	1.987	25.82	1.030
N	1.725	63.51	0.537
O	2.337	22.56	2.214
H	1.509	72.68	-0.415
$H_\alpha^*$	3.269	-12.21	0.522
$C_\beta^*$	3.448	15.17	-0.932
$H_\alpha^{**}$	3.167	11.82	-0.670
$C_\beta^{**}$	3.591	-15.53	0.726

\* L-残基      \*\* D-残基

#### 参考文献

1. Takeda, Y. (1975) Biopolymers 14, 891-894
2. 武田泰宏 (1975) タンパク質化学 第 3 巻 (今堀編, 共立出版) 第 13 章-3-1
3. 武田泰宏 (1980) 神戸女学院大学論集 第 27 巻, 27-52
4. Miyazawa, T. (1961) J. Polymer Sci. 55, 215-229

(原稿受理 1994 年 3 月 24 日)