B349

pH変化に対するアミノ酸熱重合物の自己集合と多様性

○国田 美穂子、櫻沢 繁（はこだて未来大・システム情報科学・複雑系科学）

細胞サイズの微小空間は、単に外界との境界を提供するだけでなく、分子の衝突確率を上げ空間の単位体積に対する表面積を増加するという効果をもたらす。これは原始地球上の物質進化において、少数の分子同士の反応性を高めるという意味において重要である。前生物の物質進化過程の中で微小空間を構成しうる物質としては、現存する細胞を構成している脂質だけでなく、前生物的に生成可能であったアミノ酸から生成する高分子を候補として考えることができる。

前生物的に生成可能なアミノ酸熱重合物の微小球は、pH上昇によりマイクロカプセル状に形態変化する。我々は、そのカプセル構造の形成メカニズムについての研究を行ってきた。これまでの研究で、マイクロカプセルに形態変化した微小球は、アスパラギン酸由来のカルボキシル基、及びピログルタミン酸またはプロリンのような環状アミノ酸を含むことがわかっている。

本研究では、アスパラギン酸とプロリンの他に、放電実験等で生成が確認されているアミノ酸を組み合わせた熱重合物について、微小球の形成とpH上昇によるその形態変化を調べた。その結果、アスパラギン酸とプロリンの他にバリンを含む微小球は、カプセル (TypeI 構造物) だけでなくカプセルの内部が充填した構造物 (TypeII 構造物) を形成した。得られた構造物を HPLC により分析した結果、いずれの構造物も形態変化前の微小球と同じ組成であった。これは、これらの構造物が pH 上昇による状態変化の中でダイナミックに形成されていることを示す。またある条件では、一つの溶液条件で TypeI と TypeII が共存した。これは、急激な環境変化の中では、アミノ酸熱重合物の物理反応は一つに定まらず多様性を持つことを示唆する。

M.Kunita, S.Sakurazawa : Self-Assembly and Diversity of Thermal Hetero Complex Molecule in pH Changes

B351

新しいヘリックスフィッティング法

○エンヘバヤル プレブジャブ^{1,2}、大崎 満¹、松嶋 範男²（¹ 北大院・農学部・植物機能開発、² 札幌医大・保健医療学部・物理）

蛋白質には α -helix、 3_{10} -helix などの二次構造、核酸の二重ラセンなど様々なヘリックス構造の存在が知られている。ヘリックス構造を決めるパラメーターは、ヘリックス半径、ヘリックスピッチ、およびヘリックス軸である。これまで α -helix や核酸の二重ラセンの原子座標データから、ヘリックス軸だけを決定するさまざまな方法が報告されている。また、工学や核物理学領域においてヘリックス軸が与えられている条件下でのヘリックスパラメーターを決定する方法も報告されている。Nievergelt は、ヘリックス軸が与えられていない条件下でのヘリックスパラメーターを決定する方法を提案している。この方法では、ヘリックスピッチはヘリックス半径、ヘリックス軸とは別に計算されている。しかしながら、すべてのヘリックスパラメーターを同時に決定する方法は知られていない。

本研究では、データからヘリックス半径、ヘリックスピッチ、ヘリックス軸を同時に決定する Total least squares 法を開発した。現在この方法により PDB ファイルの原子座標データを使って、 3_{10} -helix、 α -helix のヘリックスパラメーターを求めている。その結果を報告したい。

P.Enkhbayar, M.Osaki and N.Matsushima : A new method for helix fitting

B350

Protein Data BankのためのXML, PDB-ML, とそれを用いた検索システム

○伊藤 暢聡¹、小林 香織^{2,3}、坂本 久^{2,3}、中村 春木³（¹ 東京医歯大院・疾患生命、² JST・BIRD、³ 阪大・蛋白研）

Protein Data Bank は、生体高分子の立体構造情報を集めたデータベースであり、構造ゲノム科学の進展とともに、その重要性はさらに増すと思われる。しかし、PDB フォーマットとして知られる従来のフラットファイル形式には様々な問題点も指摘されている。他方で、HTML の爆発的な成功を受け、同様のテキストベースのマークアップ言語である XML が大規模なデータの保存・交換に使われている。そこで、我々は米国 Rutgers 大学と共同で PDB のための XML、PDB-ML を開発した。このフォーマットは mmCIF (macromolecular crystallographic information file) のデータ構造を基本にしており、公式ベータサイト (<http://beta.rcsb.org/pdb>) で公開の準備が進められている。一方、我々はこのフォーマットを利用した XML ベースのデータベース (XML-DB) を開発している。XPath を実装することにより、複雑な検索を簡便に行うことが可能になる。予めテーブルを用意する必要のあるリレーショナルデータベース (RDB) と異なり、すべてのデータの組み合わせが可能であり、汎用性が非常に広いことも特徴である。また、こうした検索を含めた種々の Web サービスを SOAP インターフェースにより提供する予定である。これにより、計算機同士が XML を用いて、直接データ交換ができるようになり、構造ゲノム科学の進歩で増えるであろう、大量の PDB データを網羅的に扱う研究も容易になることが期待される。DDBJ など、SOAP インターフェースを用いた Web サービスを行っている国内の他の生物系データベースと有機的な連携を図り、より有用なメソッド・サービスを提供することも視野に入れている。さらに、我々はデータ形式や検索サービス以外に、PDB のデータそのものの補完・充実を目的に、補完データの収集も行っているが、その追加データも上述の XML-DB に組み込み公開していく予定である。

N. Ito, K. Kobayashi, H. Sakamoto, H. Nakamura : PDB-ML, an XML for Protein Data Bank, and a search system with it

B352

構造プロテオミクスのためのタンパク質ドメイン同定システム: ProteoMix

○近山 英輔、黒谷 篤之、黒田 裕、横山 茂之（理化学研究所ゲノム科学総合研究センター）

構造プロテオミクスは、ゲノム上の全てのタンパク質代表構造の網羅的かつハイスループットな構造決定を目的としている。しかし、代表となる蛋白質の分子量が大きい場合、現在の技術では迅速な構造決定は難しい。従って全長のタンパク質配列を構造決定可能なサイズの構造ドメインに分解することが必須となる。そのため我々は、構造ドメイン領域を配列解析に基づいて同定するシステム (ProteoMix) を開発した。現在、ProteoMix には 20 種類以上の配列解析ツール (構造ドメイン同定、2 次構造、膜領域/膜トポロジー、単純配列、配列モチーフなど) が組み込まれており、これらを組み合わせで大量のタンパク質配列の統合解析を容易に行うことができる。構造ドメイン領域予測ツールとしては、配列の相同性から構造ドメイン領域を予測する PASS、ドメイン末端領域を予測する DLiP と DLP2 の 3 つのツールがある。さらに、ProteoMix は新たなツールを追加できる拡張性も備え、多様な目的の配列解析に柔軟に対応できる様に設計されている。

ProteoMix を用いた構造ドメイン同定法の具体例としては、上記の PASS で予測された構造ドメイン領域の両側に一定の誤差範囲内で DLiP と DLP2 のドメイン末端領域が予測されたドメインのみを選択することで、予測信頼性を上げ、また、その他の解析ツールの結果も、ProteoMix のソート/検索/マクロ機能を用いて組み合わせ、候補ドメインを次々と絞り込むことによって、大量の配列の解析結果から信頼性の高い構造ドメイン候補のみを選ぶ機能がある。

今回、ProteoMix を実際に用いて、かずさ DNA 研究所の HUGE データベースの 2001 配列を解析した。結果については年会で報告する。

E.Chikayama, A.Kurotani, Y.Kuroda and S.Yokoyama : A protein domain selection system for high-throughput structural proteomics: ProteoMix