3P065

毛髪タンパクと毛髪のセット保持性向上基剤との相互作用に関する研究

○伊藤 隆司¹、野尻 昌良¹、大塚 美和²、中村 浩一¹ (¹花王(株)ヘアケア研、²花王(株)構造解析センター)

ヘアスタイルを維持するには、従来、高分子物質などによる粘着・固着の方法が用いられてきたが、手触りが悪くなる欠点があった。それに対し、毛髪自体の改質により、ウォーターセット(例えば、湿った髪をドライヤーで乾かすなど)で作ったヘアスタイルを長く持たせることができれば、自然な感触でセットを維持でき、より消費者に満足していただける商品の開発が可能となる。我々は、リンゴ酸などの特定の有機酸を毛髪内に浸透させることで、つけたセットを高湿度下でも持たせることができるようになることを見出し、その機構解析を行ってきた。剤への浸漬処理時間を変化させて解析用毛髪を調整し、一晚減圧乾燥した後、窒素下で近赤外吸収分光測定を行った(YOKOGAWA Infra Spec NR800、分解能 8cm^{-1} 、積算1024回)。 5140cm^{-1} には水のピークが現れるが、それは剤処理時間と共に小さくなっており、水の吸着サイトが酸によって置き換わっていることがわかった。また、 4870cm^{-1} には毛髪タンパク中アミドのNH伸縮に由来するピークが現れるが、そのピーク位置は剤処理時間と共に低波数側にシフトし、NHへの水素結合性が増していくことがわかった。さらに詳細に調べるため、一般化二次元相関法により解析を行った。その結果、アミドNHのピークは、3種類の水素結合性の異なる成分からなっていることがわかった。同時・異時相関スペクトルの解析より、それらが水素結合性の弱い方から、水・タンパク・NHの水素結合、タンパク間の水素結合、タンパクNH-有機酸との水素結合であることが推察された。以上の解析より、高湿度下でのセット保持性向上機構としては、用いられた有機酸が水に置き換わって吸着し、水・タンパク同士よりも強い水素結合を形成することで、高湿度下においても水素結合の切り替えが起きにくくなることが考えられる。

T. Itou, M. Nojiri, Y. Otsuka and K. Nakamura : Study on the interaction between hair proteins and some agents which improve hair setting durability

3P067

ROKKY : 蛋白質立体構造予測の統合サーバー

○金 文珍¹、古田 忠臣²、朴 聖俊⁴、古賀 信康³、高田 彰二^{2,3} (¹ACT-JST、²神戸大・理、³神戸大院・自然、⁴東工大・総合理工)

我々は、アミノ酸配列(一次構造)から蛋白質の立体構造(三次構造)を予測するサーバーの構築を通じて、蛋白質の立体構造構築原理を理解することを目指している。

今回、我々は蛋白質立体構造予測の統合サーバー(ROKKY1)を構築した。構造予測しようとするターゲット(アミノ酸配列)は大きくCM(Comparative Modeling)、FR(Fold Recognition)、NF(New Fold)の3種類に分けることができる。(1)CMターゲットはPSI-BLASTとPDB-BLASTで配列の相同性から鋳型構造を検索できる。(2)FRターゲットにはThreadingサーバーのコンセンサスサーバー(3D-JURY)を利用して、配列のアライメント情報を得ることができる。(3)NFターゲット(PSI-BLAST、3D-JURYでスコアが良くないターゲット)はSimFold(我々独自のエネルギー関数)を用いたフラグメントアセンブリー法により構造探索を行う。(1)と(2)では、アライメントのギャップにループ構造を挿入して全残基立体構造予測を行う。また、ドメイン予測を行い、2ドメイン以上のターゲットはドメインに分けて構造予測を行う。

ROKKYは今年のCASP6のコンテストに参加した。ROKKYはCASP6の全ターゲットに対して立体構造予測を行い、結果の統合的な表示も行っている。今までの解析されているターゲットの構造と比べてみると高い類似度を持っている予測構造もある。

(1)と(2)の場合には、部分的なターゲットの予測構造は天然構造と高い類似度を持っている。(3)の場合は48時間以内での構造サンプリングが厳しくて、構造探索が難しくなっている。

1, ROKKY: <http://predict.chem.sci.kobe-u.ac.jp>

W.Jin, T.Furuta, S.J.Park, N.Koga, S.Takada : ROKKY: Protein Structure Prediction Server

3P066

ホメオタンパク質に含まれる共通ドメインホメオボックスの分類と代表構造の決定

○鎌足 雄司¹、斉藤 講平¹、泉 顕也¹、金野 大助^{1,2}、中村 安里^{1,3}、阿部 孝政¹、清宮 恭子¹、葛西 卓磨^{1,4}、柊尾 尚哉¹、近山 英輔¹、小柴 生造¹、林 文晶¹、廣田 洋^{1,5}、好田 真由美¹、井上 真¹、矢吹 孝¹、青木 雅昭¹、関 英子¹、寺田 貴帆^{1,6}、白水 美香子^{1,6}、田仲 昭子¹、小原 収^{7,8}、菅野 純夫⁹、関 原明¹、篠崎 一雄¹、林崎 良英¹、川井 悟¹、木川 隆則¹、横山 茂之^{1,4,6} (¹理研・GSC、²東大院・総合文化、³東京電機大・理工、⁴東大院・理、⁵横市大院・総理、⁶理研・播磨、⁷理研・RCAI、⁸かずさDNA研)

ホメオボックス遺伝子は発生・分化に関わる遺伝子で、そのコードするホメオタンパク質は類似した約60アミノ酸残基からなる"ホメオボックスドメイン"を持つ。このドメインはヘリックス・ターン・ヘリックス構造をとるDNA結合ドメインを構成してDNAの二本鎖の溝に入り込み特定の塩基配列に結合する。現在までに、ヒトでは450配列、全生物種では4900を超えるホメオボックスドメインを含むタンパク質配列が報告されている。我々は配列情報に基づきホメオボックスドメインの分類を行い、比較的配列相同性の低いいくつかのクラスに分けた。そして、その中の代表的な構造のいくつかをNMRを用いて構造決定を行った。全ホメオボックスドメイン配列の95%程度が、これまでに構造解析の行われている配列および今回新規に構造決定を行った配列の相同性30%以内にあり、これらについてはホモロジーモデリング法より類似配列を持つホメオボックスドメインの構造予測が可能となる。これらの構造情報は、今後、ホメオボックス遺伝子の関与する発生・分化の機構の原子レベルでの解明に寄与するものと期待される。

Y.O.Kamatari, K.Saito, K.Izumi, D.Kaneno, A.Nakamura, T.Abe, K.Seimiya, T.Kasai, N.Tochio, E.Chikayama, S.Koshiba, F.Hayashi, H.Hirota, M.Yoshida, M.Inoue, T.Yabuki, M.Aoki, Y.Tomo, E.Seki, T.Terada, M.Shirouzu, A.Tanaka, O.Ohara, S.Sugano, M.Seki,

3P068

Latest developments in ProTherm: Thermodynamic Database for Proteins and Mutants

○B a v a A b d u l l a ¹、Gromiha Michael²、上平 初穂³、北島 浩司¹、皿井 明倫¹ (¹九工大・情報工学、²生命情報科学セ、³産総研)

Thermodynamic database for proteins and mutants (ProTherm) is a collection of about 15,700 numerical data for several thermodynamic parameters, such as, unfolding Gibbs free energy change, enthalpy change, heat capacity change, transition temperature and activity, which are important for understanding the mechanism of protein stability. It also includes information about experimental methods and conditions, reversibility of folding, details about the surrounding residues in space for all mutants, sequence, structural, functional and literature information. ProTherm is cross-linked with major databases such as PIR, SWISS-PROT, PDB, Protein Mutant Database, Enzyme, BRENDA and PUBMED. Recent update includes the followings: Those entries of ProTherm with corresponding structural information are linked to Sting, a tool for analyzing sequence and structure of proteins. Structural and physico-chemical information of mutation site and surrounding residues are visualized. This helps users to analyze the thermodynamics-structure relationship. In order to check homologous structures, homologous PDB entries were linked from ProTherm. A new column was added for related entries, which help users to find all the data from the same article easily. PIR code is included for Display option in search page. PMID numbers are provided with all the references so that the references are directly linked to PubMed. ProTherm is freely available at <http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/Protherm/protherm.html>

Bava,Gromiha,Uedaira,Kitajima and Sarai : Latest developments in ProTherm: Thermodynamic Database for Proteins and Mutants