

## 5. Distance Geometry 法による生理活性ペプチド の構造の決定

草 田 祐 弘

生物は複雑な機構をもって生きていますが、その生物をかたちづくっているのは生体高分子です。生体高分子には、タンパク質・核酸・脂質があり、それぞれいろんな機能をもっています。われわれは生物の“生きている”という仕組みを理解するために、生物をかたちづくっている基本的なレベルから、ものごとを見ていこうと考えます。そして、とくに、その中でも様々な生体反応の担い手となっているタンパク質に目を向けます。

タンパク質は20種類のアミノ酸が一次元的にペプチド結合でくっついたものです。そして、その一次元的な配列 (SEQUENCE) が、S-S結合や水素結合でつながって立体構造をとります。そして、その立体構造はアミノ酸の一次元的な配列によって決まっています。われわれはこの立体構造がどうなっているかを調べました。タンパク質は、立体構造と機能が密接に結びついています。したがって、立体構造を知ることは、その機能を知るための大きな手がかりとなるのです。

ここで、われわれがやったことを簡単に説明しますと、Substance-P, CCK 8 という2つの生理活性ペプチドに関する NOE DATA をもらって、それをもとに、DISTANCE GEOMETRY という方法を使って、その構造を決定したということです。

この論文の構成を簡単に説明します。まず、Ⅱで扱ったタンパク質の機能等について述べ、ⅢでNMR実験についての説明をします。そして、Ⅳで計算方法の説明をし、Ⅴでこの研究全体をどうしての解析態度を示します。さらに、Ⅵ, Ⅶでそれぞれ、Substance-P についての結果、CCK 8 についての結果を示し、Ⅷでは解析に必要なもうひとつの計算の結果を示しています。そして最後に、Ⅸで全体のまとめとこれからの課題について述べています。