

た。このため特定のデータベースに依存することがなくなった。

この予測法をX線などにより比較的構造が分かっている膜タンパクに対して応用してみたところ、膜を横切る大きな2次構造(主に α -helix)をうまく予測することができた。また膜タンパク Photosynthetic reaction centre の三つのサブユニットH. L. Mに、切り出すセグメントの長さを変えて応用したところ膜を横切らない短い α -helix 構造も予測することができた。しかし、ハイドロパッシー法と比較して、際だって優れた点は認められなかった。

また、この予測法を構造未知の膜タンパク ATPase のFO a, FO b, FO c サブユニット, Acetylcholine receptor α サブユニットに応用した。二次構造を効果的に予測するには、他の化学修飾などの結果と合わせるのがよい。

さらに水溶性タンパクにも応用したが、よい結果は得られなかった。水溶性タンパクではまちまちの長さの二次構造が複雑に折れ曲がってできており、膜タンパクのように膜面に垂直に並んでいるのとは随分異なっている。したがって、水溶性タンパクではアミノ酸配列上離れた二次構造同士間の相互作用を無視することができないことがわかる。

12. 擬一次元有機分子化合物 TTF-QCl₄ の 磁気共鳴法による研究

吉 成 洋 祐

擬一次元有機分子化合物 TTF-QCl₄ において、4.2 K から室温までの温度領域で磁気共鳴 — 主に ESR の線幅と水素原子核の核スピン—格子緩和率： T_1^{-1} の実験を行った。得られた結果は、スピン—ソリトンの存在が明らかであるポリアセチレンの実験結果と定性的に同じ傾向を示した。Nechtschein らは「ソリトンのトラッピング」というモデルを考え、ESR・NMR 両者の実験結果を解析した。そこで彼らのモデルをこの物質に応用してみたところ、イオン性相で一次的に高速で拡散運動しているソリトンの存在を支持する結果を得ることができた。ソリトンのひろがりほぼ一分子程度と考えられ、トラップされたソリトンとの超微細接触相互作用で線幅は決まっている。また、イオン性相の T_1^{-1} は、三種類の異なるスピン — mobil soliton, trapped soliton, localized spin — が影響を持っていることがわかった。そのソリトンの拡散係数： D は絶対値として $10^{13\sim 14}$ rad/s の値を持ち、低温で温度にほぼ比例する ($D \propto T^\alpha$, $\alpha \sim 1.2$)。