

MHz における T_1 の平均値は、我々の計算では 500 ms、実験では 527 ms となった。 T_1 の計算ではタンパク質の内部運動を全く考慮しない場合に比べ、5% の増加がみられた。内部運動の計算には基準振動解析を用いているため非調和的な運動（例、ベンゼン環の 180 ring flip）は考慮されていないが、比較した NMR の T_1 の実験は、非調和効果の影響を論じるだけの精度を持っていなかった。さらに、内部運動を直接表現している Generalized order parameter (S_j) も計算し、Levy らの、Molecular Dynamics による計算と比較した。

3. 蛋白質立体構造計算アルゴリズム DADAS 法の方法手順改良

松 隈 純 滋

生体の重要な有機構成成分は、糖質、脂質、そして蛋白質の三つに大別される。しかし、これら三大栄養素の持つ生体における意義を考えると蛋白質だけは特殊な立場にある。糖質、脂質は身体の構成成分としての働きを持つが、本来の目的は、酸素と結合しエネルギーを発生させることである。蛋白質は、身体のうちで行われる様々な化学反応の進行、調整を行い、さらに異物に対する防御反応、運動、自己複製といった全ての生命の維持発展に不可欠の要素である。筋肉にはアクチン、ミオシンという蛋白質が存在し、腱、真皮、骨、及び軟骨には、コラーゲンという繊維状の蛋白質が含まれ、毛髪、表皮にはケラチンという硬い蛋白質が含まれている。蛋白質一分子は、20 数種のアミノ酸が一本の鎖状に結合したものであり、蛋白質の種類によりそのアミノ酸配列は異なっている。そして、その立体構造はそれぞれの蛋白質に特有のものとなっている。消化酵素やホルモンも蛋白質である。結合したアミノ酸の数が比較的に少ないため、一般的に立体構造は球状をしている。球状蛋白質の立体構造の細部を眺めてみると、その機能と立体構造の相関が浮かび上がってくる。蛋白質の立体構造を知ることは、蛋白質の機能発現のメカニズムを探るための大きな助けとなる。

ここ数年の間に、NMR を用いて蛋白質の溶液中の立体構造を決定できるようになってきた。それまでは、X線結晶解析法が唯一の立体構造決定法であった。NMR から得られる蛋白質分子中の原子間の距離の情報を基に立体構造を計算するアルゴリズムは distance geometry 法と呼ばれ、様々な方法が考え出されている。その中で最も成果をあげているのは郷 - Braun に

よって開発された DADAS 法¹⁾である。日本では、ペプチドと呼ばれる小さな蛋白質の NMR 実験、及び立体構造計算は既にいくつか報告されている。しかし、蛋白質について ^1H -NMR の実験をしている研究者は少ない。増して、蛋白質の立体構造が再現できる程の詳細かつ高精度の実験はほとんどなされていない。我々の研究室と東京都臨床医学研究所の神田、稲垣両博士との共同研究によって、日本で初めて NMR のデータから溶液中の EGF (53 残基) の立体構造を決定するというプロジェクトが持ち上がった。我々の研究室では、DADAS 法の計算手順の確立はされていないのに加えて、生の NMR のデータから蛋白質の立体構造を決定した経験はなかった。丁度、Wagner らによって BPTI (58 残基) の溶液中の立体構造決定に関する論文が発表された²⁾この計算は DADAS 法ともう一つ別の方法の二つの方法でなされた(この DADAS 法のプログラムは、現在日本にあるものとは若干異なるものである)。BPTI は詳細で高精度の NMR 実験がなされ、立体構造計算のためのデータも十分吟味されている。そこで、論文中の生の NMR のデータを用いて、DADAS 法の従来の計算手順の改良を行った。これは、EGF の立体構造決定にも効果を発揮した³⁾

この論文には、BPTI の立体構造計算の従来の手順と、改良された手順の結果を示した。また、改良された手順によって神経毒ペプチド Conotoxin GI の立体構造を計算した。1985 年に DADAS 法によって Conotoxin GI の溶液中の立体構造は決定されているが⁴⁾その時には報告されなかった興味深い結果が得られたのでそれを報告する。

4. 長距離拡散による相分離

興 梶 光 治

秩序化過程の理解は非平衡統計力学の重要な課題である。これまでに秩序化過程に対する多くの理論による研究、実験による研究、計算機実験による研究がなされてきた。熔融状態の 2 種の高分子からなる系(以下ポリマーブレンドという)でも秩序化過程が観察されるが高分子には動的性質において他の系では見られない特徴があるため秩序化過程に限らず高分子からなる系の動力学は研究対象として興味深いものである。本論では熔融状態のポリマーブレンドの秩序化過程に対するコンピュータ・シミュレーションに適したモデルを提案する。

まず § 2 において秩序化過程に対する研究を簡単に紹介し、特に後期過程が興味ある研究対