

ミオグロビン、ヘモグロビンにおける二次構造ブレイカとヘアピン構造のメカニズム

今井賢一郎* 朝川直行 辻敏之 園山正史 美宅成樹

名古屋大学 大学院 工学研究科

*E-mail: imai@bp.nuap.nagoya-u.ac.jp

要旨

二次構造ブレイカやヘアピン構造形成は、タンパク質の構造形成に対して強い制限を与える。そこで、典型的なall- α 型のタンパク質であるミオグロビン、ヘモグロビンに注目し、二次構造ブレイカとヘアピン構造のメカニズムについて解析を行った。以前の研究で、我々は、二次構造ブレイカにはプロリン、グリシン、両親媒性残基の3種類があることを示した。これら3種の二次構造ブレイカを予測する方法でミオグロビン、ヘモグロビンのアミノ酸配列を解析したところ、ループ構造の7本中5本がこれらのブレイカによって折りたたまれていることがわかった。さらに電荷分布の対称性を調べたところ、電荷分布の対称性とヘアピン構造には高い相関があることが見出され、電荷分布の対称性がヘアピン構造形成の駆動力になっていることが示唆された。これらのことから電荷の対称性と二次構造ブレイカに注目することで、ミオグロビン、ヘモグロビンのすべてのループの折りたたみをとらえることができた。

キーワード：二次構造、二次構造ブレイカ、水溶性タンパク質、両親媒性、電荷分布、構造予測

領域区分：分子生物学における情報計算技術