

繊維タンパク質の三次元構造推定アルゴリズムの考察

Algorithm to estimate the three-dimensional structure of fiber protein

○堀川康太、杉本泰伸、三宅淳
阪大院基礎工

X線の散乱・回折を利用した生体分子の構造解析の手法には、試料の状態により主として3種の方法が存在する。すなわち、結晶構造解析、小角(溶液)散乱、繊維回折である。位相問題に対し、結晶構造解析では、重原子同型置換法や多波長異常分散法などにより位相決定を行うことで、これまで数多くの構造が解析されてきた。一方溶液散乱では、慣性半径などの解析に加えて、近年では *ab initio* な構造推定方法が開発され、モデル三次元構造を推定する手法として用いられるようになってきている。

これらに対し、繊維回折ではさまざまな方法を用いて構造が解析されてきたが、広く一般的に用いられる試料の解析法はあまり存在しない。そこで本研究では、繊維状構造を持つ物質に対して、X線回折強度からの汎用的な構造モデリングの構築を目的として、プログラムの開発を試みた。

繊維回折に対するプログラムは、まず探索範囲として繊維軸方向の周期を仮定し、この周期と同じ長さを持つ円柱を想定する。これを探索空間とし、内部にビーズが最密充填するような座標を設定し、充填する。これを初期状態とする。この座標上のビーズが存在する／存在しないというように、状態を変更することで、任意の構造を構築し、モデルから得られる散乱強度を計算して、実験で得られた散乱強度を比較する。これを焼きなまし法により最適化を行うことで、観測された回折強度を最もよく説明するモデルを得ることを目的とした。

プログラムの検証には、繊維軸に沿った凹凸のある円柱リブ構造の理論強度、カエル骨格筋の弛緩状態のX線繊維回折実験により得られた回折強度の二種類のデータを用意した。

繊維回折強度に対するモデリングを行った結果、層線強度データは、よく再現することができた。一方、ビーズモデルは円筒リブ構造に関しては比較的良い再現性を示すことが出来たが、カエル骨格筋に関してはあまり再現性が示せなかった。その原因を考察する。