

α ヘリックス上の位置およびそれを取り巻く環境に 依存したアミノ酸出現頻度

輪湖 博^{1*}、安 江虹²、皿井明倫²

¹ 早稲田大学社会科学部 〒169-8050 東京都新宿区西早稲田1-6-1

² 理化学研究所・筑波研究所分子遺伝学研究室

〒305-0074 茨城県つくば市高野台3-1-1

*E-mail: wako@waseda.jp

要旨

蛋白質の立体構造をドロネー四面体分割することで局所構造を定義する方法(Wako and Yamato, *Protein Eng.* **11**, 981-990 (1998))を用いて、 α ヘリックス上の位置およびそれを取り巻く環境に依存したアミノ酸出現頻度を解析した。ドロネー四面体分割法は、与えられた蛋白質の立体構造（ここではC α 原子のみを考える）が占める空間を、頂点をC α 原子とする四面体で一意的に分割する。そして、各四面体に、それを含む局所構造の特徴を反映したコード（文字列）を指定することが出来る。 α ヘリックス内部では36種類のコードが指定されるが、そのコードの違いは、主として、 α ヘリックスを取り巻く4つのアミノ酸残基の有無を反映している。すなわち、 α ヘリックスを取り巻く環境をそのコードによって表すことが出来る。そこで、われわれは、それぞれのコードについて（環境への依存性）、四面体のそれぞれの頂点における（ α ヘリックス上の位置への依存性）アミノ酸出現頻度を調べた。さらに、主成分分析を用いて、 α ヘリックスにおけるアミノ酸出現頻度の一般的な描像、またN末端・C末端における出現頻度などもそのコードを使って解析した。

キーワード：ドロネー分割、局所構造モチーフ、アミノ酸置換、主成分分析、ヘリックス・キャッピング

領域区分：分子生物学における情報計算技術