

こ と ば

バイフット (Bijvoet) 対およびバイフット比: 逆空間において原点をはさんで点対称の位置関係にある2点をフリーデル対という。異常散乱がない場合二者の構造因子は振幅が一致し、 $|F(h,k,l)|=|F(-h,-k,-l)|$ というフリーデルの法則が成り立つ。一方、異常散乱があり結晶が中心対称性を持たない場合は、二者の振幅は必ずしも一致しない。その差 ($|F(h,k,l)|-|F(-h,-k,-l)|$) をバイフット差と呼び、バイフット差の絶対値の期待値を構造振幅の期待値で割ったものをバイフット比と呼ぶ。これは観測できる異常分散効果の大きさの目安になる。結晶に対称性があると、フリーデル対のそれぞれと逆空間の対称性で関連づけられる反射どうしについても上の議論が成り立つ。この場合のペアはバイフット対と呼ばれる。

(中根崇智 東大・理)

SHELX: George Sheldrickによって1970年代から開発されている歴史ある構造解析プログラム群。ウェブサイト (<http://shelx.uni-ac.gwdg.de/SHELX/>) でユーザ登録を行うことにより、学術目的では無償で利用できる。ソースコードも従来は公開されており、多くのプログラムに影響を与えてきたが、近年、非公開となってしまった。生体高分子の実験的位相決定では、SHELXCによる入力ファイルの作成、SHELXDによる部分構造(重原子のみで構成される部分的な構造)の決定、SHELXEによる位相計算・位相改善・ポリアラニンによる自動トレースを使用する。その他、生体高分子における用途としては、高分解能データの場合にSHELXLによって最小二乗法による精密化を行うこともできる。

(中根崇智 東大・理)

Buccaneer: 英国ヨーク大学のKevin Cowtanによって開発された、高速な自動モデリングプログラム。電子密度マップとアミノ酸配列を与えると、側鎖まで含んだモデルを自動で組み立ててくれる。内部的には、マップの解釈によるモデル作成と、REFMACによるモデルの精密化を数回反復している。核酸の自動モデリングには、同作者によるNautilusが利用できる。他の自動モデリングプログラムとしては、ARP/wARPやPHENIX AutoBuildがあげられる。2.5Å程度の分解能があればモデルの大部分を自動構築することができるが、電子顕微鏡などから得られた低分解能(>3.5Å)マップの自動解釈にはまだ困難があり、改良の努力が進められている。

(中根崇智 東大・理)

DNAバーコード: 商品の識別で用いられているバーコードと同じように、生物標本の識別のために用いられる塩基配列をDNAバーコードという。従来は、種の識別に用いられる天然の塩基配列のことであった。近年は、同一実験内の標本を識別する人工的な塩基配列として、多様な用途が考案されている。この用途に共通する基本的な考え方は、複数の標本をDNAバーコードで標識し、それらを混合して実験操作した後、次世代シーケンサーによる塩基配列解析で実験結果を確認する際に、DNAバーコードで標本を識別するというものである。一例として、出芽酵母では遺伝子破壊株のそれぞれが別々のDNAバーコードで標識されている。これら破壊株を特定の環境で混合培養し、DNAを抽出してDNAバーコードの出現頻度を調べれば、その環境で有利・不利な遺伝子破壊を量的に評価できる。

(守屋央朗 岡山大・異分野融合先端研究コア)

AGCキナーゼファミリー (AGC kinase family): セリン/トレオニンキナーゼのサブファミリーで、cAMP-dependent protein kinase (PKA), cGMP-dependent protein kinase (PKG), protein kinase C (PKC) の触媒ドメインと相同性の高い触媒ドメインを有するキナーゼ群からなり、上記3種以外にAkt, S6K, RSK, PDK1, MSK, GRK, SGKなど60種類以上のキナーゼが含まれる。多くのAGCキナーゼは、触媒ドメイン中の活性化ループおよび、それに続く疎水性領域からなる「制御モチーフ」のリン酸化により活性化する。増殖因子受容体などさまざまなシグナルの下流で働き、それぞれ特有のコンセンサス配列(主にN末端側にArg/Lysを含む)を有する基質をリン酸化し、細胞増殖や分化など多様な細胞機能に寄与している。

(石川絵里 阪大・微研)

コアグララーゼ (coagulase): 黄色ブドウ球菌が分泌する血漿凝固タンパク質。病原性を示す黄色ブドウ球菌のほとんどはコアグララーゼを産生するが、他のブドウ球菌属菌は産生せず、菌を血漿に懸濁した際の凝固の有無を調べるコアグララーゼ試験は古くから黄色ブドウ球菌の鑑別に用いられる。コアグララーゼは、それ自身に酵素活性はなく、N末端のD1-D2 (domain 1-domain 2) を介してプロトロンビンに結合し、これを活性化してフィブリノーゲンのフィブリンへの分解を引き起こす。また、コアグララーゼのC末端のR (repeat) ドメインはフィブリノーゲンに結合する。コアグララーゼの作用で宿主成分のフィブリンで覆われることにより、黄色ブドウ球菌はオプソニン化と食細胞による貪食を免れ、宿主の免疫反応を回避する。

(伊藤佐生智 名市大・薬)