「見てわかるタンパク質　ー生命科学のための立体構造データの利用法」

プログラム１）PDB データの検索・見方（工藤）

PDBj では PDB データを検索するためのウェブインタフェース「PDBj Mine」を提供しています。このインタフェースは大元となる PDB データファイルの内容を関係データベースに取り込み、ウェブ経由で PDB データを検索できるようにしたものです。PDBj Mine ではキーワードで検索できるだけではなく、公開日、著者名、生物種、鎖のタイプや長さ、含まれるリガンドなど様々な条件で結果を絞り込むこともできます。各 PDB エントリーの情報ページには、よく参照される情報を構造、機能などのカテゴリごとに分類して表示しています。また分子をマウス等で対話的に操作することができる分子ビューアを埋め込んだインタフェースも用意しています。本講習会ではこの PDBj Mine を使った検索と結果の閲覧について紹介と演習を行います。

プログラム２）ブラウザと構造ビューアで 3 次元構造を眺める（鈴木）

本講習では、実際にブラウザや原子ビューアを操作して原子モデルを眺め、構造データを調査することを体験します。PDBj のサービスである「万見」と、高機能分子構造ビューア「UCSF-Chimera」を利用し、PDB のデータの基本的なルール、「生物学的単位」の意味と対応方法、リガンドの位置や結合部位を調べる方法、きれいな絵の描き方などについての講習を行う予定です。構造解析の非専門家から初心者を想定した内容を予定しています。

プログラム３）

ホモロジー・モデリングの基礎と複合体立体構造の検索・モデリング（川端）

「立体構造はアミノ酸配列に比べて進化的に保存しやすい」ため、アミノ酸配列しかわからないタンパク質でも、相同なタンパク質の立体構造があれば、それをもとに立体構造の情報を得て、モデルを作ることができます（ホモロジー・モデリング）。本講義では、アミノ酸配列を出発点としたときに、どうやって相同タンパク質の立体構造を見つけ、それを鋳型としてモデルを作成するかについて解説します。UCSF Chimera を使った簡便な配列―立体構造の比較法、HOMCOS サーバを用いた複合体立体構造の検索・モデリングの方法について、パソコンの操作法を具体的に説明いたします。