

H27 年 PDBjing & 創薬等情報拠点講習会 「見てわかるタンパク質 ―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) PDBj と wwPDB の活動について (中村)

PDBj と wwPDB の活動についてご紹介します。

プログラム 2) PDBj からの構造情報の取得 - PDBj Mine の使い方 (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 3) PDBj からの構造情報の取得 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 3 次元構造を眺め、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。分子構造生物学の非専門家から初心者を対象とした内容を予定しています。

プログラム 4)

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。

プログラム 5)

ProMode とその利用法 (猿渡)

ProMode は、PDB データの基準振動解析の結果を公開しているデータベースです。二面角を独立変数に採用することで、PDB データのすべての原子を考慮しても、分子構造を比較的少ない自由度で記述することができ、また、弾性ネットワークモデルを採用したことで、タンパク質分子のみならず、DNA、RNA、リガンドなどの分子を取り入れた計算が行えます。この 4 月より、PDB の新規エントリー構造(巨大分子を除く)について自動的に ProMode に必要なデータを計算し、Web で公開されるようになりました。本講義では、ProMode の理論的背景と Web で表示される情報の解説と応用例についてお話します。(Web での表示では Java の最新版(www.java.com)が必要です。前もってインストールされることをお願いいたします。)