

有機性・無機性値とともに見る LIGPLOT 公開データを利用した分子モデル集

本間善夫¹

¹ 県立新潟女子短期大学(〒950-8680 新潟県新潟市東区海老ヶ瀬 471)

1. はじめに

タンパク質のはたらきを知る上で、リガンドとその結合部分の相互作用(鍵と鍵穴の関係)を知ることが重要である。PDBsum サイト¹⁾にはその相互作用部位を示す LIGPLOT²⁾計算結果が公開されており、水素結合部分の表示を含む立体構造も Jmol³⁾形式等で参照できる。その PDB 形式データから、サイト構成アミノ酸の特性基の有機性・無機性値⁴⁾を算出するエディタマクロを作成し、Jmol 版分子モデルとともに Web ページとして公開した。

2. リガンドとサイト部分の有機性・無機性値算出と Jmol 形式データの表示

PDBsum からダウンロードできるリガンド+サイトの構造データから、そのサイト構成アミノ酸の特性基の有機性・無機性値⁵⁾の総計を自動で算出するエディタマクロを作成した⁶⁾。リガンドについては別途作成済みの Excel シート⁷⁾で有機性・無機性値を求め、それらを表にして、Jmol スクリプトにより水素結合部分も表示しアミノ酸残基については性質別に色分けできるようにした分子モデル(図 1 が表示例)と一緒に参照できる Web ページ⁸⁾を公開し、適宜データを追加している。

リガンドとサイト構成アミノ酸それぞれの有機性値(O)と無機性値(I)の比 I/O の間には良好な相関関係が得られた。

また、公開ページにはアニメーション GIF 画像集や教材的な自作ブログ記事へのリンクも掲載し、データの見方をわかりやすくする工夫もしている。

参考文献・Web ページ

- 1) PDBsum home page, <http://www.ebi.ac.uk/pdbsum/>.
- 2) LIGPLOT, <http://www.biochem.ucl.ac.uk/bsm/ligplot/ligplot.html>.
- 3) Jmol, <http://jmol.sourceforge.net/>.
- 4) 甲田善生, 「有機概念図 一基礎と応用一」, 三共出版(1984).
- 5) 本間善夫, 金子祐子, 津野あゆみ, 日本環境化学会第 12 回討論会講演要旨集, pp.128-129(2003).
- 6) 本間善夫, http://www.ecosci.jp/pdb/hm/macro_g1.html#pdbsum01.
- 7) 本間善夫, http://www.ecosci.jp/sheet/orgs_help.html.
- 8) 本間善夫, http://www.ecosci.jp/pdb/pdbsum_site.html.

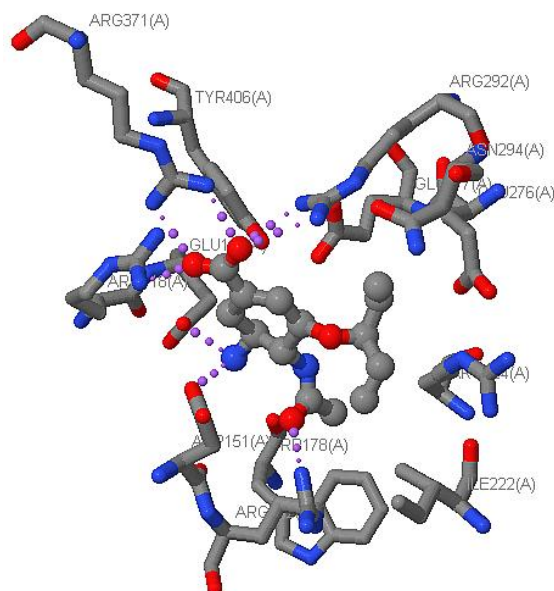


図 1 公開 Web ページ⁸⁾の表示例. 抗インフルエンザウイルス薬オセルタミビル(タミフル)の活性体 GS4071 を含むノイラミニダーゼの PDBsum データ 2qwk より. 8 個の水素結合がある. リガンドは I/O=1.607, サイトは I/O=1.882.