

演 題	PDB データの Ligand 結合部位のデータ集作成	
発 表 者 (所 属)	本間 善夫 (県立新潟女子短期大学)	
連 絡 先	〒950-8680 新潟県新潟市海老ヶ瀬 471 県立新潟女子短期大学 TEL: 025-270-0299 FAX: 025-270-5173 E-mail: honma@muf.biglobe.ne.jp	
キーワード	PDB, タンパク質, DNA, Ligand, 分子モデル, プラグイン, 有機概念図	
開発意図 適用分野 期待効果 特徴など	PDB 収録データの中には, Ligand 結合部位や活性部位が SITE 情報として記載されているものがある。それに相当するアミノ酸残基部分だけを抜き出したデータを作成し, 分子表示プラグインにより参照できる Web 教材集を作成した。また, Ligand と SITE 構成残基との関係を有機概念図で解析した。	
環 境	適応機種名	インターネット, Chime (plug-in), Excel が利用可能なパソコン
	O S 名	
	ソース言語	HTML, Chime スクリプト, RasMol スクリプト
	周辺機器	
流通形態 (右のいずれかに○をつけてください)	・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする	具体的方法 以下のサイトで利用可能。 http://www.ecosci.jp/pdb/pdb_site.html
	・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ○その他	

1. はじめに

ヒトゲノム完全解読に続き, 創薬などを視野に入れたタンパク質研究への関心も一層高まり, バイオインフォマティクス研究の推進が図られている。また, 2003 年の SARS 禍²⁾においても, 原因ウイルスに関する DNA・タンパク質情報の共有化がなされた。タンパク質立体構造の中でも, Ligand 結合部位や活性部位のアミノ酸残基配列と Ligand の関係は重要であり, Protein Data Bank (PDB)³⁾ 登録データの中にもそのような部位が SITE 行に記載されている場合がある。生体分子の学習を目的として既報⁴⁾で, PDB データから座標データだけ抜き出して教材集を公開したのに続き, 今

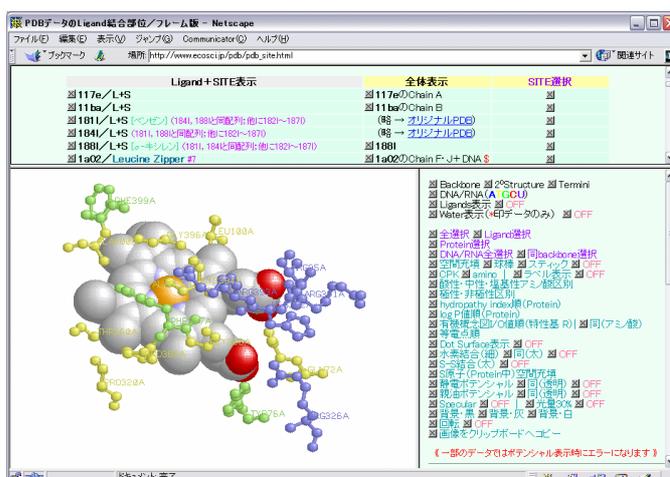


図1 PDB データの Ligand 結合部位データ集⁶⁾の表示例. PDB ID **1EA1** について, アミノ酸を酸性・中性・塩基性アミノ酸区別表示にした場合.

回はその SITE 情報を抽出したファイルにより分子表示プラグインの Chime (MDL 社)⁵⁾ を利用して様々な分子情報を参照できるデータ集を作成した^{6,7)}。

2. PDB データの Ligand 結合部位教材集の作成と公開

PDB³⁾ 収載データファイルには様々な情報が記述されており、他の多くのデータベース等でも活用されている。その中で、Ligand 結合部位等を記載した SITE 情報は生体分子の“鍵と鍵穴”の関係を知る上で有用である。

該当部分だけを抜き出したファイルを作成し、Web ブラウザと Chime⁵⁾ を利用して立体モデルを表示できるデータ集を公開した⁶⁾

(図 1)。スクリプト記述により、ボタンを押すだけで残基や低分子を選択したり、アミノ酸を色分け表示(酸性・中性・塩基性アミノ酸区別、等電点値順など)させたりできるようにしたものである。

また、Zinc Finger や Leucine Zipper など、特徴的なモチーフ配列を参照できるデータや、

MOLDA for Protein Modeling⁸⁾ で

作成したデータ(図 2)を用いた参考教材も収録して、バイオデータベース活用入門版としての役割も付与した。さらに、Ligand と SITE 構成アミノ酸残基の関係を定量的に評価するために、有機概念図の有機性(O)・無機性(I)を計算できる Excel 計算シートを作成した^{7,9)}。表 1 にその計算例を示す。

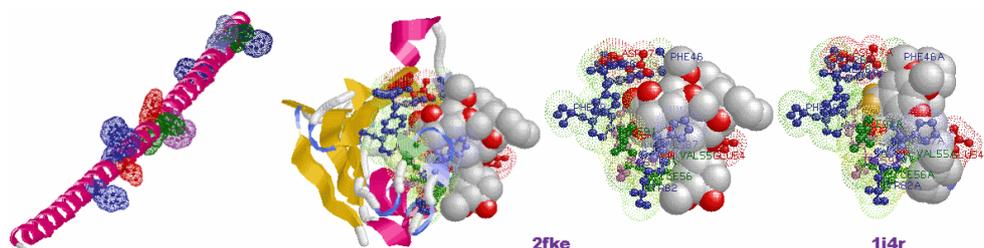


図 2 PDB データの Ligand 結合部位データ集⁶⁾による **2FKE** と **1J4R** の画像例。[左]両者と同配列で α -helix 構造にしたもの (MOLDA for Protein Modeling⁸⁾ で組立て; SITE 部位強調表示), [中 2つ]実際の **2FKE** とその活性部位, [右]**2FKE** 活性部位と同じ配列番号のアミノ酸を SITE とした **1J4R**。

表 1 有機概念図⁹⁾計算を Ligand (下段) と SITE 構成アミノ酸残基 (上段) について行った例 (同配列の **2FKE** と **1J4R**)。

アミノ酸	n	hydropathy index	残基 R の I・O 計算					
			O'	I'	I'/O'	$\Sigma O'$	$\Sigma I'$	$\Sigma I' / \Sigma O'$
Asp	1	-3.5	40	150	3.75	40	150	
Glu	1	-3.5	60	150	2.5	60	150	
His	1	-3.2	80	152	1.9	80	152	
Val	1	4.2	50	0	0	50	0	
Tyr	2	-1.3	140	115	0.821429	280	230	
Ile	2	4.5	80	0	0	160	0	
Phe	3	2.8	140	15	0.107143	420	45	
Trp	1	-0.9	180	130	0.722222	180	130	
	12					1270	857	0.6748

PDB ID	Ligand			
2FKE	FK506, C ₄₄ H ₆₉ NO ₁₂	880	747	0.8489
1J4R	FKB-001, C ₃₅ H ₄₂ N ₂ O ₆ F ₂	730	390	0.5342

参考文献・Web ページ

- 1) たとえば, 文部科学省資料例, http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/15/08/03082203.htm.
- 2) たとえば, 本間善夫, http://www.ecosci.jp/chem11/sars_avd.html.
- 3) Protein Data Bank, <http://www.rcsb.org/pdb/>.
- 4) 本間善夫, 化学ソフトウェア学会年会 2002 研究討論会講演要旨集, pp.68-69.
- 5) MDL, <http://joel.mdli.com/products/framework/chime/index.jsp>.
- 6) 本間善夫, http://www.ecosci.jp/pdb/pdb_site.html.
- 7) 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.55-56.
- 8) 吉田弘, <http://www.molda.org/molda-p/download.html>.
- 9) 本間善夫, http://www.ecosci.jp/sheet/orgs_help.html.