

# 膜タンパク質の Web 教材集作成

広瀬可奈子<sup>1</sup>, 本間善夫<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 県立新潟女子短期大学 (〒950-8680 新潟県新潟市海老ヶ瀬 471)

## 1. はじめに

近年のバイオサイエンス・ライフサイエンス重視の流れもあり, 高等学校理科でも「理科総合 A」に『生物のつくる物質』, 「化学 II」に『生命と物質』が導入されるなど, 化学分野でも生体分子を扱う機会が一層増えるものと思われる。本研究室ではこれまでに, Protein Data Bank (PDB)<sup>1)</sup>登録データを利用し, Web ブラウザと分子表示プラグインの Chime (MDL 社)<sup>2)</sup>を用いて 3次元モデルをインタラクティブに参照できる生体高分子関連データ集を公開してきた<sup>3-5)</sup>。ここでは, シグナル伝達やイオンチャネルなど生体内で重要な働きをしている膜タンパク質 (ヘリックス型および バレル型) の分子構造の詳細を学べる教材集を公開したので報告する。

## 2. 膜タンパク質の Web 教材データ集の作成

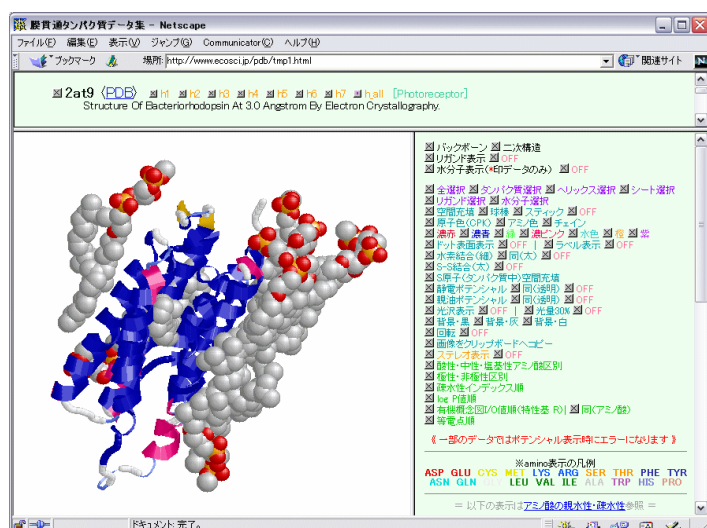


図1 ヘリックス型膜貫通タンパク質 PDB データ集<sup>7)</sup>の表示例 (2at9 の場合; 二次構造で膜貫通ヘリックスを濃色表示, リガンド等は空間充填表示)。

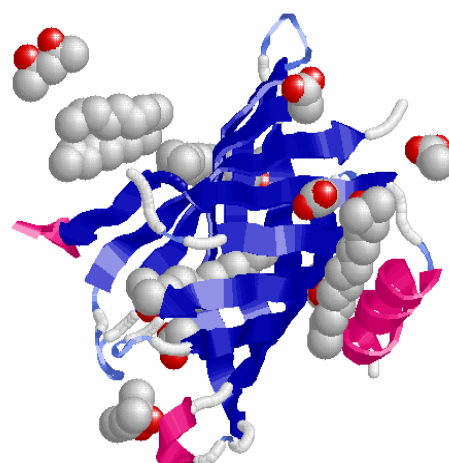


図2 バレル型膜タンパク質データ集<sup>8)</sup>の表示例 (1thq の場合; 濃色表示は シート部分)。

生物の細胞膜を貫通するなどしている膜タンパク質<sup>6)</sup>には, ヘリックス構造では代表的な 7 回膜貫通タイプや シート構造から成る バレル型など, 特徴的な貫通部分を有するものや, アンカー等により膜と一定の相互作用を示すものなど様々なタイプがある。特に膜貫通タイプは, 脂質二分子膜の膜厚に相当する長さの疎水性部分を持つことで親和性を獲得し, その上で細胞内外の多様な情報伝達を担ったり水分子やイオンの能動輸送に関わるなど, 生命活動の維持に不可欠な働きに即した構造を有しており, タンパク質の構造と性質の関係を学ぶ上で興味が尽きないものばかりである。

そこで, ヘリックス型の膜貫通タンパク質 PDB データ集<sup>7)</sup> (図 1 が表示例) と バレル型膜タンパク質データ集<sup>8)</sup> (図 2) を作成し, 前者は SOSUI WWW Server<sup>9)</sup> で判別される膜貫通部分,

後者では PDB<sup>1)</sup>の Sequence Details ページから参照できる Protein Dossier 構造情報中の SS\_PDB 記載部分を抽出し、それぞれ Rasmol スクリプト記述によりボタンを押すだけで選択して表示変更を可能にした。これにより、バイオ関連の論文・雑誌等に出ているような説明用のカラー画像を容易に自作することができる。

また、著名なテキストエディタである秀丸<sup>10)</sup>を用い、それらの膜貫通部分の 1 文字アミノ酸配列情報から、3 文字アミノ酸記号または疎水性インデックス値<sup>11)</sup>に変換した上で表形式の HTML データに変換する秀丸マクロを自作して<sup>12)</sup>、様々な参考ページも作成して膜タンパク質理解の一助とした<sup>13)</sup>。このマクロは改変することによっていろいろな利用が可能である。

例えば図 3 は、膜貫通タンパク質 PDB データ集<sup>7)</sup>に収載した各データの膜貫通部分の疎水性インデックス値の平均値を大きさ順に並べたものであり、最大値は 1.892、最小値は 1.194、最頻値は 1.339 であった。なお、値が 1.425 の 1fqy は、2003 年のノーベル化学賞<sup>14)</sup>を受賞した Peter Agre 教授らによるアクアポリン（水チャネル）である。

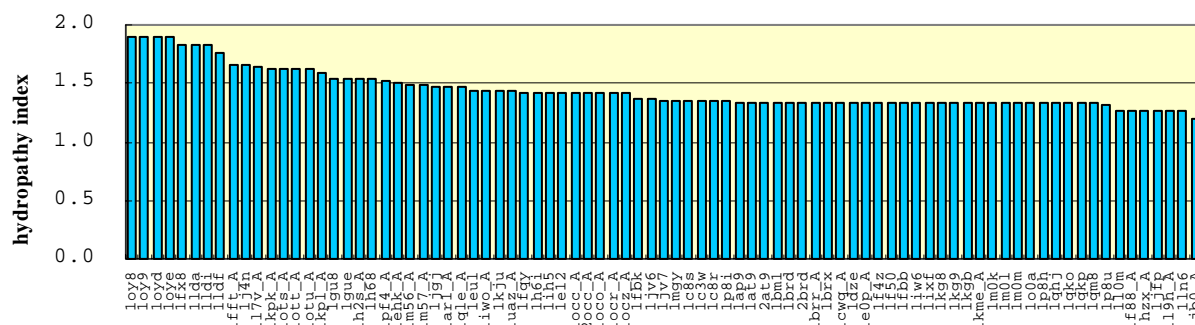


図 3 SOSUI<sup>9)</sup>で求めた ヘリックス型膜貫通タンパク質<sup>7)</sup>の貫通部分の疎水性インデックスの平均値順に並べたグラフ。

以上のコンテンツ群により、膜タンパク質について多彩な情報表示が可能な分子モデルによって視覚的に理解することができ、様々な図表データでその意味をより深く学べることから、多くの利用者に対して生体高分子に対する興味を喚起できるものと考えられる。

#### 参考文献・Web ページ

- 1) Protein Data Bank, <http://www.rcsb.org/pdb/>.
- 2) MDL, <http://www.mdli.com/jp/index.jsp>.
- 3) 本間善夫, 日本コンピュータ化学会 2002 秋季年会講演要旨集, pp.68-69.
- 4) 本間善夫, 日本コンピュータ化学会 2003 秋季年会講演要旨集, pp.84-85.
- 5) 陸美由紀・本間善夫, 日本コンピュータ化学会 2004 秋季年会講演要旨集, 講演番号 1P06.
- 6) 例えば, Bruce Alberts ほか著, 中村桂子・松原謙一 監訳, 『細胞の分子生物学 第4版』, pp.593-613, ニュートンプレス(2004).
- 7) 本間善夫, <http://www.ecosci.jp/pdb/tmp1.html>.
- 8) 本間善夫, [http://www.ecosci.jp/pdb/tmp\\_b1.html](http://www.ecosci.jp/pdb/tmp_b1.html).
- 9) 美宅成樹, <http://sosui.proteome.bio.tuat.ac.jp/sosuiframe0.html>.
- 10) 斉藤秀夫 ほか, <http://hide.maruo.co.jp/software/hidemaru.html>.
- 11) Kyte and Doolittle, *J. Mol. Biol.*, **157**, 105-132(1982).
- 12) 本間善夫, [http://www.ecosci.jp/pdb/hm/macro\\_g1.html](http://www.ecosci.jp/pdb/hm/macro_g1.html).
- 13) 本間善夫, <http://www.ecosci.jp/pdb/r/>.
- 14) The Nobel Prize in Chemistry 2003, <http://www.nobel.se/chemistry/laureates/2003/public.html>.