

金属原子を含む生体分子の SITE データ集

石部万葉¹、○本間善夫²

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)

² 新潟県立大学(〒950-8680 新潟県新潟市東区海老ヶ瀬 471)

1. はじめに

金属原子は活性が高く、生物にとっては本来悪影響を及ぼす存在との見方があり、封じ込んで他への悪影響を防ぐタンパク質が存在する一方、その活性を自身の生命活動に利用してしまうという戦略を積み重ね、今では必須元素となっているものが少なくない¹⁾。

生体分子構造データベースPDBにも金属原子を含むデータが多数あることに着目し、生体分子と金属原子との関係を分子ビューア Jmol で参照できる教材データ集²⁾の作成を開始して公開した。

2. 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

新データ集は既報のリガンドが主に有機化合物の「PDBsum の Ligand-SITE 情報と有機性・無機性」データ集^{3,4)}と対をなすものでもある。同データ集同様、PDBsum サイト⁵⁾で PDB 形式データを入手し、自作エディタマクロ⁶⁾により SITE 構成アミノ酸の特性基の有機性・無機性値を算出して分子モデルと併記するようにした(図1が画面例)。

単独の同一原子でも、SITE 構成アミノ酸が異なり多様性があることがわかり、水銀 Hg やカドミウム Cd では水俣病やイタイイタイ病を考える視点を与えたり、ファイトレメディエーションを説明に利用でき、Zinc finger など生体分子の高次構造の特徴の概観も可能である。

金属原子の有効利用の面では、酸素を運搬するヘモグロビンの Fe、光合成におけるクロロフィルの Mg やマンガンクラスターの Mn・Ca など、高校生物でも重要な題材と関わってくる。

今後も適宜データを追加し、原子別の個別コンテンツ(図2に例)も作成する予定である。

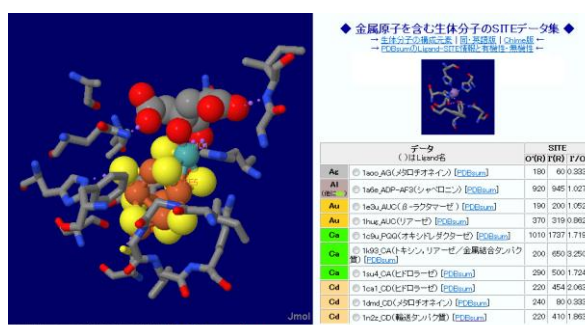


図1 データ集画面例。FeとMoを含むPDBデータ1MIN (Fe-Mo-S クラスタ Fe₇MoS₉ ほかを含む)。

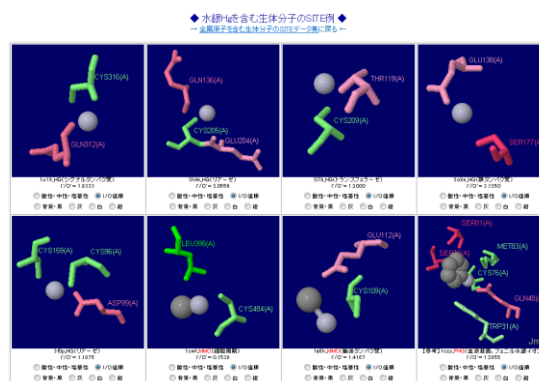


図2 「水銀 Hg を含む生体分子の SITE 例」⁷⁾。

参考文献・Web ページ

- 1) たとえば、桜井弘 編, 「生命元素事典」, オーム社(2006)
- 2) 本間善夫, http://www.ecosci.jp/s/bm_m.html
- 3) 本間善夫, http://www.ecosci.jp/pdb/pdbsum_site.html
- 4) 本間善夫, 日本コンピュータ化学会 2008 秋季年会講演予稿集, 1P03
- 5) PDBsum home page, <http://www.ebi.ac.uk/pdbsum/>
- 6) 本間善夫, http://www.ecosci.jp/pdb/hm/macro_g1.html#pdbsum01
- 7) 本間善夫, http://www.ecosci.jp/s/bm_m_Hg.html