

タンパク質立体構造研究への応用

PDB代表タンパク質チェーン決定システム

タンパク質立体構造データベース (PDB) は、近年の X線結晶回折や NMR による構造解析技術の進歩と電子顕微鏡による構造解析の増加によって急増し、2002年3月の時点で 17,600 エントリーを超えた。各種生物種のゲノムプロジェクトの後を受けて始まった「構造ゲノミクスプロジェクト(ゲノムの中に含まれるタンパク質立体構造をすべて決める)」によって、今後さらにその増加は加速すると予想されている。しかしながら、冗長さやデータの不完全性のために、PDB の全てのエントリーがタンパク質の立体構造解析に適しているとは言えず、何らかの基準で分類して、代表タンパク質を決定する必要がある。

タンパク質は、一つにつながったチェーン*が折り畳まり、それが単独もしくは複数結合することによって特有の構造を作り、機能を発揮する。我々はこのチェーン同士を比較・分類し、その中から任意の優先度で選ばれた代表チェーンを決定するシステム (PDB代表タンパク質チェーン決定システム: PDB-REPRDB)¹⁾ を構築した。従来はチェーン同

士の比較・分類は近似的に配列の類似性 (ID%) を指標にして行われてきたが、本システムでは、ID% による分類に、チェーンを重ね合わせた時の原子間距離の最大値 (Dmax) と平均原子間距離 (rmsd) を分類の指標に加え、より正確な分類を自動的に行っている。また、本システムは、WWW によるインタフェース (図1) を用いることで、それぞれの研究に合った代表セットを即時に提供できるようにしている。

本システムで作成した代表タンパク質チェーンは、タンパク質二次構造予測²⁾ の基礎データとなる構造ライブラリのセットや、並列タンパク質情報解析 (PAPIA) システム³⁾ の検索対象となるデータベースの作成に用いられている。さらに、ID% が高いタンパク質同士の比較から、部分的に構造変化を起こしている部位 (図2) の検出にも利用可能である。

本システムは、PAPIA システムの WWW サーバーにて公開している。

*チェーン 20種類の基本アミノ酸がペプチド結合を繰り返してできるポリペプチド鎖。タンパク質によって、含まれるアミノ酸の量・結合順序が異なる。

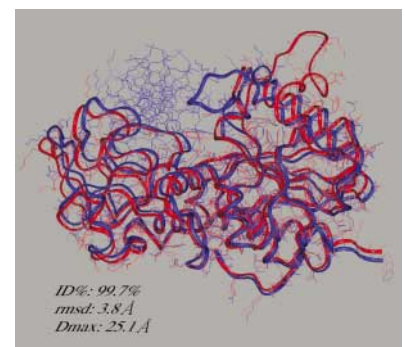


図1 (左) PDB代表タンパク質チェーン決定システム: PDB-REPRDB の WWW ページ

図2 (上) DNAが結合したことによって構造変化を起こした例: HhaI DNA Methyltransferase
青色のリボン、DNAが結合した構造: 6MHTA、赤色のリボン、単量体の構造: 1HMY



のぐち たもつ
野口 保
noguchi-tamotsu@aist.go.jp
生命情報科学研究センター

関連情報

- 1) T. Noguchi, K. Onizuka, M. Ando, H. Matsuda and Y. Akiyama : Bioinformatics 16, 6, 520-526 (2000).
- 2) T. Noguchi, M. Ito, H. Matsuda, Y. Akiyama and K. Nishikawa : Research Communications in Biochemistry, Cell & Molecular Biology 5, 115-131 (2001).
- 3) <http://www.cbrc.jp/papia/>