

2007 年度 近畿大学 農学部 生命情報学演習

2007 年 5 月 22 日 (火) 担当 : 川端 猛

立体構造データの可視化と立体構造予測

所属 : _____ 学部 _____ 学科 _____ コース _____ 学年 _____

学籍番号 : _____ 氏名 : _____

演習資料は <http://isw3.naist.jp/IS/Kawabata-lab/lec-ja.html> から入手できます。

課題 1 (2 次構造の構成・リガンド・SS 結合・リガンド分子の観察)

(問 1) 以下の 6 つの立体構造を RasMol で表示し、次のコマンドを打ち込むことで、構造クラス、リガンドのタイプ、SS 結合の数を記入せよ。

<code>wireframe false</code>	(ワイアフレーム表示を一度オフにする)
<code>select protein</code> <code>cartoon</code>	(蛋白質を選択し、カートゥーン表示にする)
<code>color chain</code>	(鎖ごとの色分けにして鎖の数を確認)
<code>color structure</code>	(2次構造ごとの色分けにして、構造クラスを確認)
<code>select ligand</code> <code>spacefill</code>	(リガンドを選択して、空間充填モデルで表示)
<code>color cpk</code>	…もし、リガンドがあれば、マウスでクリックして名前を確認…
<code>select CYS</code> <code>color cpk</code>	(Cysteine を選択し、ワイアフレームで表示)
<code>wireframe 100</code>	(近接する Cys があるかどうかでジスルフィド結合の有無をチェック)
<code>select nucleic</code> <code>spacefill</code>	(核酸を選択して、空間充填モデルで表示)

PDB コード	蛋白質の鎖数	構造クラス (all-、all-、 /、+)	リガンド名(FAD,GOL などの 3 文字表 記)・核酸名(DNA,あるいはRNA)	ジスルフィド結合 の数
1tph				
1fxd				
1mbd				
1kel				
1flv				
1a0a				

all- : ヘリックスが主で、シートはほとんどない。 all+ : シートが主で、ヘリックスはほとんどない。

/ : ヘリックスとシートが混在し、平行のシートが多い。ヘリックスとシートが配列上交互に現れる傾向。

+ : ヘリックスとシートが混在し、逆平行のシートも多く含まれる。

(問2) 1ovo.pdb の構造は上の6つの構造の中では_____と最も似ている。

(問3) 1fdn.pdb の構造は上の6つの構造の中では_____と最も似ている。

課題2 (アミノ酸配列からの立体構造予測と金属結合部位の予測)

MATRAS サーバ(<http://biunit.naist.jp/matras>)を用いて、PLAS_ORYSA の配列の立体構造の予測を行ってください。以下にマルチプルアライメントから得られたファミリー内での保存サイトを で囲んであります。これらの保存サイトが立体構造上、どのような場所に位置するか確認してください。最後に銅の結合しているアミノ酸4つを、RasMol から読み取り、以下のアミノ酸配列に で囲みなさい。

```
>PLAS_ORYSA Plastocyanin "Oryza sativa (Rice)"
001 M A A L S S A A V T I P S M A P S A P G 020
021 R R R M R S S L V V R A S L G K A A G A 040
041 A A V A V A A S A M L A G G A M A Q E V 060
061 L L G A N G G V L V F E P N D F T V K S 080
           67           71       73
081 G E T I T F K N N A G F P H N V V F D E 100
      81           94 95
101 D A V P S G V D V S K I S Q E E Y L N A 120
121 P G E T F S V T L T V P G T Y G F Y C E 140
                               133 135 139
141 P H A G A G M V G K V T V N
      141 142           146 147           153
```

入力するコマンドの例

```
select 67,71,73,81,94,95,133,135,139,141,142,146,147 (保存残基を選択)
wireframe 100
select ligand (リガンド(銅)を選択して、空間充填モデルで表示)
spacefill
```