

MATRAS サーバを用いた立体構造予測：簡易ホモロジーモデリング

平成19年5月

川端 猛

アミノ酸配列だけから立体構造を推定することを立体構造予測といいます。立体構造予測には様々なアプローチがありますが、本演習では、最も単純で有効性の高いホモロジーモデリング法を行います。一般にホモロジーモデリング法は、以下のような2段階からなります。

[ステップ1]：テンプレート構造の発見 (Fold recognition)

予測したい配列に最も近いと思われる立体構造（テンプレート構造）を既知の構造データベースの中から見つける。

[ステップ2]：全原子の構造の構築 (Modeling)

発見したテンプレート構造を元にして主鎖構造をできるだけ維持するようにして、側鎖構造の構築、削除・挿入されたアミノ酸の主鎖構造の構築を行う。

本演習では、[ステップ1]の部分を MATRAS サーバを用いて、blastp のプログラムで行い、[ステップ2]はアミノ酸名と残基番号を置き換えるだけの簡易法をやはり MATRAS サーバの機能を用いて行うことにします。

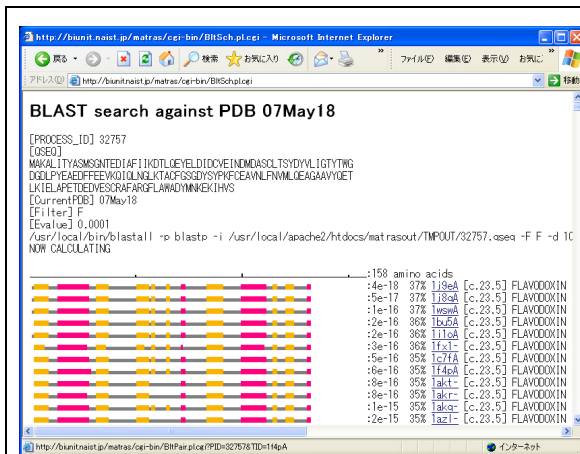


(1) MATRAS サーバ

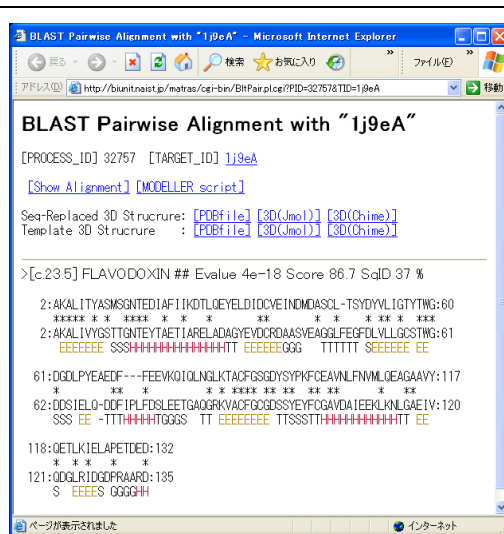
<http://biunit.naist.jp/matras/>
にアクセスし、[Sequence Search vs PDB]
をクリックします。



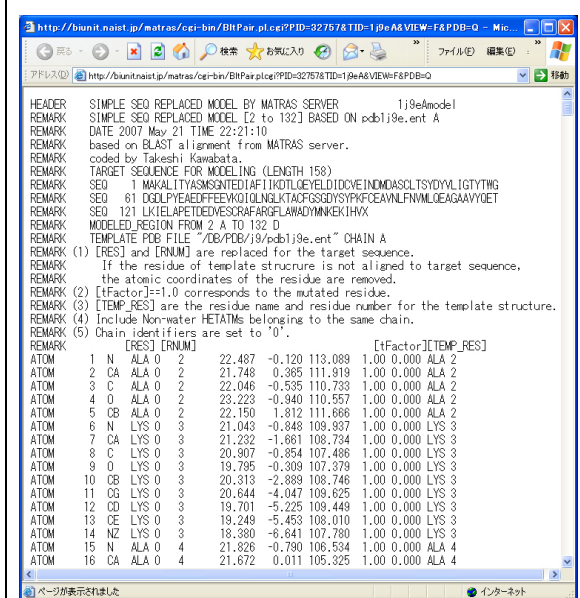
(2) 予測したいアミノ酸配列をペーストし、[Search]をクリックします。すると、最新の PDB のアミノ酸配列データベースに対して、blastp が実行されます。



(3) blastp の結果が、2次構造のバーの形式で表示されます。次に E-value が最も低い PDB コード名をターゲット構造として選択して、クリックします。



(4) クエリ配列と、指定した PDB のエントリーとのアライメントが表示されます。次に、Seq-Replaced 3D structure の [PDBfile] をクリックします。



(5) クエリ配列のアミノ酸名・残基番号に書き換えたターゲット構造が PDB 形式で表示されます。次に、ブラウザの [ファイル] メニューから、[名前を付けて保存] を選択します。



(6) ファイル保存のためのウィンドウが表示されます。ファイルの種類を必ず [テキストファイル (*.txt)] と指定し、ファイル名の末尾が、.pdb であるようなファイル名を入力して、保存してください。

保存された予測構造は、通常の PDB ファイルと同じように、RasMol で可視化することができます。