

発表題目	PDB 部分データによる Web 教材集の作成	
発表者 (所属)	本間 善夫 (県立新潟女子短期大学)	
連絡先	〒950-8680 新潟県新潟市海老ヶ瀬 471 県立新潟女子短期大学 TEL: 025-270-0299 FAX: 025-270-5173 E-mail: honma@muf.biglobe.ne.jp	
キーワード	分子モデル, 化学教育, plug-in (プラグイン), PDB, タンパク質, DNA	
開発意図 適用分野 期待効果 特徴など	PDB に収録されているデータの一部を切り取ってサイズを小さくしたデータと分子表示プラグインを利用し, Web 上でタンパク質や DNA・RNA についてわかりやすく学べる教材集を作成して公開した。	
環 境	適 応 機 種 名	インターネットと ChemscapeChime が利用可能なパソコン
	O S 名	
	ソース言語	HTML, Chime スクリプト, RasMol スクリプト
	周 辺 機 器	
流通形態 (右のいずれかに をつけて ください)	・化学ソフトウェア学会の無償利用ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない その他	具 体 的 方 法 以下のサイトで参照可能。 <a href="http://www2d.biglobe.ne.jp/~chem_env/pdb/miniPDB.html">http://www2d.biglobe.ne.jp/~chem_env/pdb/miniPDB.html</a>
		・未定

## 1. はじめに

これまでに多様な分子情報を表示できるプラグインの Chime (MDL 社)<sup>1)</sup>を利用して, 多様な教材コンテンツ<sup>2)</sup>やダウンロード可能なデータ集<sup>3,4)</sup>を Web 上で公開してきた。さらに, 複数分子を同一データとして表示して各分子の大きさの影響や形状の同異などを容易に把握できる教材集も作成し, 分子と分子の相互作用をわかりやすく呈示する試みも続けている<sup>5)</sup>。

その相互作用を知る上で, タンパク質や DNA, RNA は不可欠な素材である。通常の分子と比べてそのデータサイズは桁違いに大きいのが, 近年, ADSL, CATV, 光ファイバ, 無線 LAN といった高速なインターネット接続環境の整備が急速に進んで, その利用に対するストレスが低下してきている。

そこで, Protein Data Bank (PDB)<sup>6)</sup>で公開されているデータを利用し, Chime によってブラウザに表示して Chime スクリプトおよび RasMol スクリプト記述によるボタン操作により, タンパク質, DNA・RNA, ligand の分子表示形式を個別に切り替えられるコンテンツを作成して公開した<sup>7)</sup>。

## 2. PDB 部分データを利用した Web 教材集の作成と公開

PDB<sup>6)</sup>には、多くの研究者によってタンパク質やDNAの立体構造データの蓄積が続けられ、共有知的財産として様々な活用がなされている。その独特のデータ形式により、Chime<sup>1)</sup>などのソフトウェアで多様な分子情報の表示が可能であるほか、加工や別計算への利用もできるようになっている。PDBデータを用いて独自の計算を行った上で2次データベースとして公開されている例としては、eF-site(タンパク質分子表面の形状と性質)<sup>8)</sup>やProMode(タンパク質ドメインの運動)<sup>9)</sup>などがある。また環境ホルモン(内分泌攪乱物質)問題でも、3D-QSARによるスクリーニングにおいてPDBデータが活用されている<sup>10)</sup>。

本研究では、タンパク質・DNA・RNAの構造やligandとの関係をわかりやすく学べるように、PDBデータの中から複数のChainを含むものを選び、その中の1つのChain(DNAでは必要な塩基部分)を切り取ってデータサイズを小さくし、ChimeおよびRasMolスクリプト記述によりWebブラウザ中で初心者でもボタンを押すだけで容易に分子情報を表示変更できる教材集を作成した。さらに、PDBデータの必要な部分の切り出す方法やその呈示方法がわかるHTMLソースも掲載し、同様のコンテンツを容易に作成できるよう便宜を図った。創薬や化学物質の毒性等の研究、ナノテクノロジーなど、今後一層進展が期待される分野における成果をインタラクティブに解説する日本語Web教材が多数発信されることにより、それらの分野に関心を持ってくれる小学生・中学生・高校生が増えていくことを期待している。

### 参考文献・Web ページ

- 1) <http://www.mdlchime.com/chime/> .
- 2) 分子の教材データベース, [http://www2d.biglobe.ne.jp/~chem\\_env/chem2/mol\\_db00.html](http://www2d.biglobe.ne.jp/~chem_env/chem2/mol_db00.html) .
- 3) 本間善夫, 化学ソフトウェア学会年会 2001 研究討論会講演要旨集, pp.68-69 .
- 4) 本間善夫・吉田 弘・松浦博厚, 化学ソフトウェア学会年会 2001 研究討論会講演要旨集, pp.90-91 .
- 5) 本間善夫, 日本化学会第 81 春季年会講演要旨集 I, p.650(2002) .
- 6) <http://www.rcsb.org/pdb/> .
- 7) [http://www2d.biglobe.ne.jp/~chem\\_env/pdb/miniPDB.html](http://www2d.biglobe.ne.jp/~chem_env/pdb/miniPDB.html) .
- 8) <http://ef-site.protein.osaka-u.ac.jp/eF-site/> .
- 9) <http://pdbjs1.protein.osaka-u.ac.jp/ProMode/> .
- 10) 例えば, 経済産業省, 内分泌かく乱作用に関する試験法開発状況について(平成 13 年度第 2 回内分泌かく乱作用検討小委員会配布資料, 2001/10/06) , <http://www.meti.go.jp/report/downloadfiles/g11126qj.pdf> .



図1 PDB部分データによるコンテンツ例(ビタミン関連分子を含むタンパク質から1BU5のchain A). ボタンによる表示変更により, タンパク質の $\alpha$ -ヘリックス構造・ $\beta$ -シート構造をわかりやすくし, ligandは親油性ポテンシャル表示した場合.

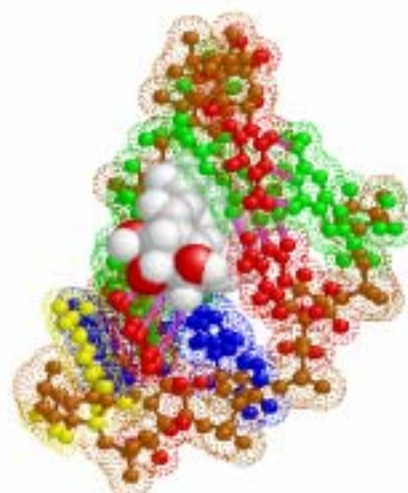


図2 benzo[a]pyrene 代謝物のDNAへのインターカレーションのデータ(PDBの1DXA)から作成したコンテンツの表示例.