

平成 17 年度 第 3 回 VBL セミナー (3rd VBL Seminar, 2005)

日時 : 平成 17 年 9 月 22 日(木) 13:30~16:00

場所 : 名古屋大学フロンティアプラザ (VBL) 4F セミナー室

Date: 22 September, 2005, 13:30 – 16:00

Place: Seminar room, 4th floor, VBL

Programme

13:30-14:00

Introductory comments by Prof T. Yamane

2名の講師による講演の概要を、日本語で紹介する

14:00-15:00

“HIGH THROUGH-PUT CRYSTALLOGRAPHIC TOOLS IN STRUCTURAL GENOMICS : a.Iterative ACORN , b.SAS”

By Prof. Devadasan Velmurugan (VBL 招聘研究者, University of Madras, India)

Abstract

As there are lacks of amino-acid sequences available for which three dimensional structures are not known, Structural Genomics eventually requires high throughput crystallographic tools to arrive at these structures in short time. The presentation will cover two such tools using which structures could be solved in about two to four hours with just a Pentium IV PC. Iterative ACORN can bring out successful results even if the first run fails in building a model using ARP/wARP. With Single-wavelength Anomalous Scattering (SAS) data, the position of even a single anomalous

a.Iterative ACORN , b.SAS” by Prof. D. velmurugan

scatterer is sufficient enough for phasing. Use of SHELXD/SHELXE/ARP/wARP/REFMAC and SHELXD/OASIS/ARP/wARP/REFMAC combinations will be detailed in two test cases.

構造ゲノミクスにおける迅速結晶構造解析の手段: a) ACORN、b) SAS

概要

3次元構造が未知で利用できるアミノ酸配列情報がない場合、構造ゲノミクスでは短時間で構造を得るための迅速結晶構造解析の手段が必要である。この講演では、pentium IV PCで2-4時間で構造をとくことが可能なという手段を紹介する。もし最初にAER/wARPでモデル作成に失敗したとしても、ACORNの繰り返しにより有望な結果が得られる。単波長異常分散(SAS)データにより、1個の異常散乱因子の位置からでも位相計算には十分である。構造解析ソフトウェア SHELXD/SHELXE/ARP/wARP/REFMAC の利用と SHELXD/OASIS/ARP/wARP/REFMAC の組み合わせによる解析の例を2件紹介する。

15:00-16:00

“VISUALIZATION OF BIOLOGICAL MACROMOLECULES”

By Dr. Kanagaraj Sekar (VBL 招聘研究者, Indian Institute of Science, INDIA)

Abstract

A general problem in visualizing the three-dimensional structure of the protein molecule is to investigate the relationship of amino-acid sequence with the structural information and its functional specificities. The first step of a complete structure prediction schema starts from the amino-acid and then proceeds to its structure, fold and finally structure dependent function. Analysis of three-dimensional structure of protein molecules is greatly enhanced by understanding the relationship between the individual protein molecules. Furthermore, knowledge of the three-dimensional structural relationship between different protein molecules is a key issue in understanding the structure and function. The details related to various issues of visualization will be discussed.

生体巨大分子（タンパク質）の可視化

概要

タンパク質分子の3次元構造の可視化における問題は、アミノ酸配列と構造情報ならびにその機能の特異性との相関を調査することである。全体構造の予測の第1段階はアミノ酸から始まり、それからその構造、折りたたみ、最終的に構造に依存した機能に進む。タンパク質分子の3次元構造の解析は、個々のタンパク質分子間の相関を理解することにより、多いに促進される。さらに、異なるタンパク質分子間の3次元構造の相関を知ることは、構造と機能の理解の鍵となる。可視化の様々な課題を紹介する。

問い合わせ先：

田渕 雅夫(名古屋大学 VBL)

山根 隆 (工学研究科・生物機能工学分野)

Tel: 052-789-5430

052-789-3339

E-mail: tabuchi@vbl.nagoya-u.ac.jp yamane@nubio.nagoya-u.ac.jp

(Contact to: Prof. Takashi Yamane, yamane@nubio.nagoya-u.ac.jp Tel: 052-789-3339)