

AlphaFold3構造解析演習

ソフトウェア・材料

- AlphaFold 3 (<https://alphafoldserver.com/about>) *Googleアカウントが必要
- ChimeraX (<https://www.cgl.ucsf.edu/chimerax/>) *あらかじめダウンロード
- Pikip-1 HMA domain + AvrPikDの結晶構造 (PDB: 6g10)

AlphaFold3によるタンパク質構造予測手順

1. AlphaFold serverにgoogleアカウントでログイン。
2. Molecule type > protein
3. Copies > 1
4. Paste sequence or fasta > アミノ酸配列をペースト
5. “Continue and preview job”を押す。
6. 得られた構造予測データをダウンロード。

ChimeraXによるタンパク質構造解析手順

1.

| |
|--------------------------------------|
| Pikip-1/AVR-PikCとPikip-1/AVR-PikDの比較 |
|--------------------------------------|
2. ドラッグ&ドロップで構造予測データ (.cif) をChimeraXで開く
3. Home> Background> White
4. Graphics> Lightning & Effects> Flat
5. Tools> Structure Analysis> Matchmaker
6. Apply> OK
7. #Chainに基づき色を変える
color #1/A #0067f47f
color #2/A #28cd413f
color #1/B #ff950081
color #2/B #ff950081
8. #HMAドメイン以外の色を薄くする
color #1/B: 1-185, 264-1142 #ff950019
color #2/B: 1-185, 264-1142 #ff950019
9. #水素結合を表示する
hbonds (#1/a & protein) restrict (#1/b & protein) distslop .2 reveal t rad .1 color gold
log true
hbonds (#2/a & protein) restrict (#2/b & protein) distslop .2 reveal t rad .1 color gold
log true
#distslop .2; 距離許容値±0.2 Å

- #reveal t; 全ての水素結合原子を表示
- #rad; 水素結合を示す擬似結合に使用するÅ単位の半径
- 10. #水素結合に関わるアミノ酸を表示する
cartoon supp f
- 11. #元素の色を変更する
color byhet
#赤; 酸素, #青; 窒素, #黄; 硫黄
- 12. #水素結合の領域をズームインする
view hbondatoms clip false
- 13. #水素結合にラベリングする
la hbondatoms residues font "Arial" height 1 bg 20,20,20
- 14. データ保存
File > Save > 保存フォルダ指定 > .cxsを指定
- 15. 画像保存
File > Save > 保存フォルダ指定 > .pngを指定
- 16. Pikp-1/AVR-PikDのAF3予測構造と結晶構造の比較
- 17. #PDBから構造を読み込む
open 6g10
- 18. #Chainに基づき色を変える
color #3/A #ff950081
color #3/B #ff950081
color #3/C #28cd413f
- 19. Tools> Structure Analysis> Matchmaker
- 20. Reference structure; AF3予測構造
- 21. Apply> OK
- 22. データ保存
File > Save > 保存フォルダ指定 > .cxsを指定
- 23. 画像保存
File > Save > 保存フォルダ指定 > .pngを指定

応用編

疎水性相互作用 (特にファンデルワールス結合) の検出

1. contacts #1/A@C* restrict #1/B@C* distanceOnly 3.8 reveal true name vdW log true
 - ・ ChimeraXでは非極性相互作用を簡単に決定する方法はないので、手動で行う。ほとんどのファンデルワールス (vdW) 相互作用は、関係する原子の大きさにもよるが、2-4 Åの範囲である。そこで、3.8 Åの距離にあるリガンドとタンパク質の間のすべての結

合を表示する

- ・ 3.8 Åという数字は任意なので、変更してもよい。3.8を使っても結果が得られない場合は、もっと大きな数字にする (4.0 Åや4.2 Åも妥当である)
- ・ C*は"すべての炭素原子"を意味する。つまり、"鎖A, B間の炭素の3.8 Åの距離の接触をすべて表示する"という意味になる

全てのコンタクトの検出

1. `contacts ignoreHiddenModels true log true`
2. Contactsの中からnon-polar interaction (vDW, π - π) を見つける

Molecular displayの変更

- ・ Molecular display> Coloring> Electrostatic> Right mouse> Clip
- ・ Molecular display> Coloring> hydrophobic> Right mouse> Clip