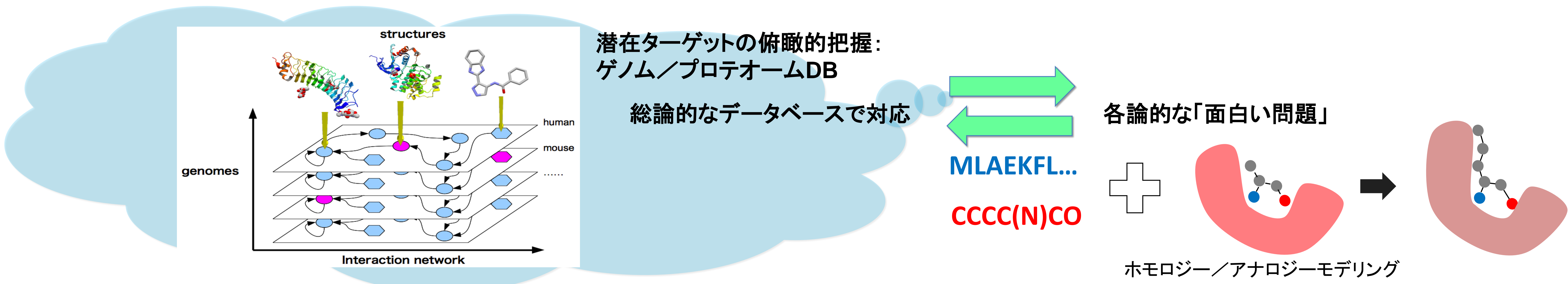


分担機関 大阪大学蛋白質研究所 (金城 玲)

分担課題 構造生命科学データクラウドにおける蛋白質構造データ解析関連技術の開発と支援

【課題概要】 生体における蛋白質の役割を、各種モデル生物のゲノム情報および蛋白質間相互作用、蛋白質-化合物間相互作用、遺伝子共発現データを統合することによって、どの蛋白質の構造がまだ解かれていないか、複合体を形成するか、モデリング可能か、結合化合物の傾向と行った情報を俯瞰できるようなデータベースを構築する。また、その過程で得られたデータベース活用のノウハウを文書化して公開することにより、生命科学コミュニティを支援する。

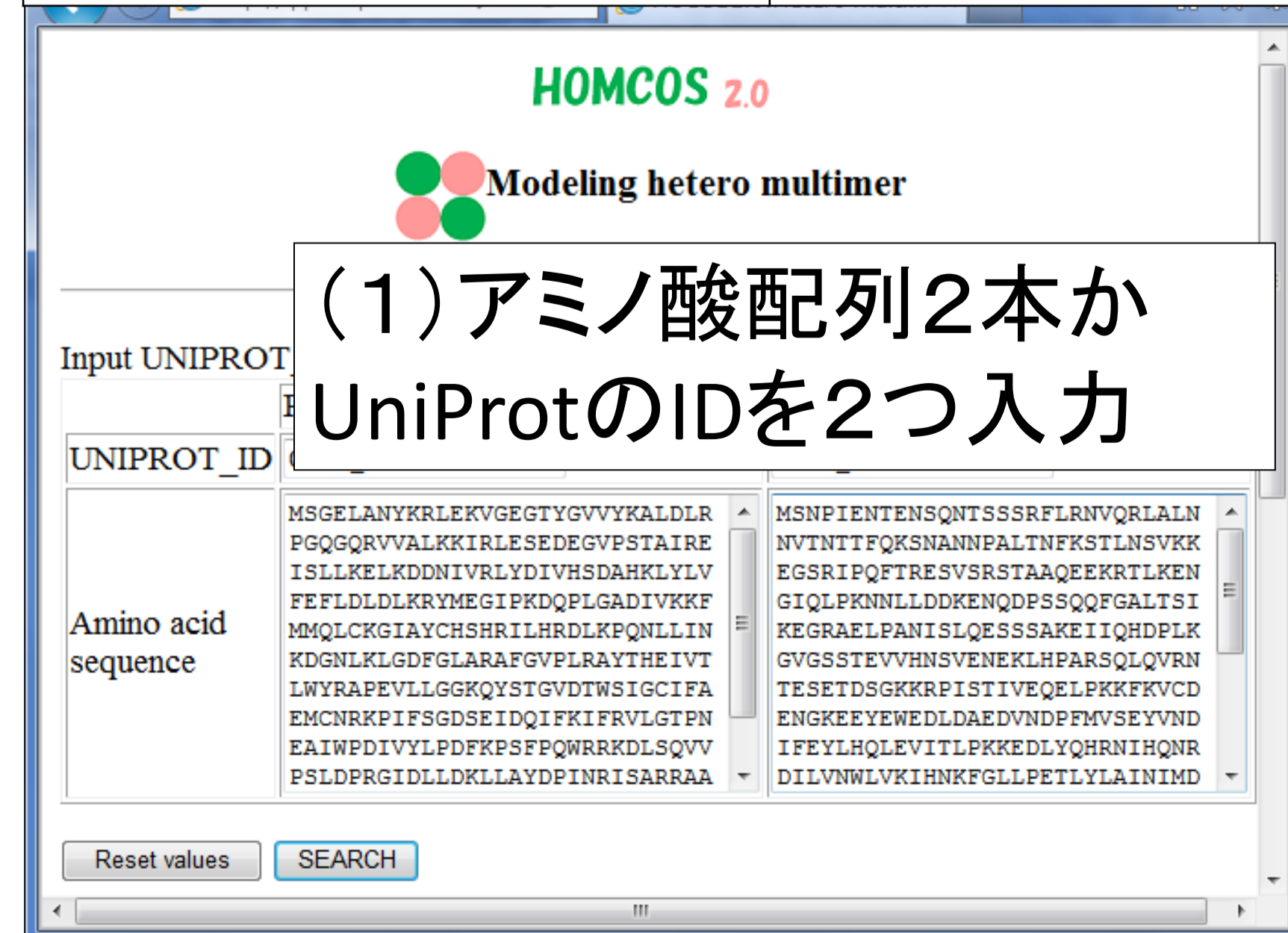


HOMCOS 2.0: 相同複合体の検索・モデリングサーバ

<http://iproo.protein.osaka-u.ac.jp/homcos2>

HOMCOS2.0は、PDBに収納されている複合体の立体構造データを利用して、分子の類似性・相同性から、構造未知の分子ペアの複合体構造を予測するためのサーバです。PDB内から結合する分子を検索したり、アミノ酸配列や化学構造から複合体立体構造を予測することができます。タンパク質の配列類似性検索にはBLASTを、化合物の構造類似性検索にはKCOMBUを用いています。

サービス	入力1	入力2	出力	
PDB内の結合分子の検索	タンパク質に対する検索	アミノ酸配列	入りに相同なタンパク質の結合分子の一覧	
	化合物に対する検索	化合物構造	入りに類似した化合物の結合タンパク質の一覧	
複合体立体構造のモデリング	ホモ多量体のモデル	アミノ酸配列	ホモ多量体の3Dモデル構造	
	ヘテロ多量体のモデル	アミノ酸配列A	アミノ酸配列B	ヘテロ多量体の3Dモデル構造
	化合物-タンパク質複合体のモデル	アミノ酸配列	化合物構造	化合物-タンパク質複合体の3Dモデル構造



ヘテロ多量体のモデリングの例

(2) PDBの複合体データベースに対して、BLASTが2回実行され、それぞれのホモログで複合体を構成されるPDBエントリのリストが表示される

PDB	asmbi	Nsubunit	Nres_con_align	N (asym oper)xN	298aa eval	SqID	N (asym oper)xN	491aa eval	SqID	Model
3f5x	1	8-mer	32	4 C 1 C 2 A 3 A 4	9e-135	65.4	4 D 1 D 2 B 3 B 4	3e-32	36.1	Model
3f5x	3	2-mer	29	1 A 1	4e-135	65.4	1 B 1	2e-32	36.0	Model
3f5x	2	4-mer	32	2 C 1 A 4	9e-135	65.4	2 D 1 B 4	3e-32	36.1	Model
3f5x	4	2-mer	32	1 C 1	9e-135	65.4	1 D 1	3e-32	36.1	Model
1okv	1	2-mer	34	1 A 1	6e-135	65.4	1 B 1	5e-33	36.1	Model

