



日本バイオインフォマティクス学会 2019年年会
第8回生命医薬情報学連合大会 IIBMP2019
ランチョンセミナー

日時：2019年9月10日（火） 12:00-13:00

会場：東京工業大学・大岡山キャンパス くらまえホール

1. PDBj での分子検索・モデリングサービス

川端 猛(大阪大学蛋白質研究所)

PDB データベースには、蛋白質単体だけに限らず、二つ以上の分子が結合した複合体の立体構造のデータが多く登録されています。蛋白質と化合物の複合体、蛋白質どうしの複合体、蛋白質と核酸の複合体など多くの種類があり、こうした複合体の立体構造の情報は、分子間の相互作用の仕組みや、アミノ酸変異が蛋白質の安定性や機能に与える影響を考える上で重要です。PDBj では、アミノ酸配列や化学構造式をクエリとして、立体構造を検索し、類似立体構造があれば、それを元にモデリングを行う様々なサービスを公開しており、複合体立体構造も扱うことができます。本講演では、こうした検索・モデリングサービスを紹介するとともに、PDB をめぐる最近の状況についても説明します。

2. PDB 検証レポートを利用した PDBj 検索サービスの紹介

横地 政志(大阪大学蛋白質研究所)

現在、PDB に登録されている全エントリーは、構造モデル、実験データだけでなく、構造モデルの妥当性、座標と実験データの一致度合いを検証するための独立した報告書が付随しています。この PDB 検証レポートを用いれば、構造モデル、実験データの矛盾を残基レベルで特定できるので、論文の査読過程で利用が進んでいる一方、得られた構造モデルを再利用する際の情報源として利用する価値もあると思われます。本講演は、PDB 検証レポートを如何に次の研究に役立てられるのかという視点で、各 PDBj 検索サービスを紹介します。

Protein Data Bank Japan
<https://pdbj.org>

PDBj 事務局

Tel: 06-6879-4311

PDBj データベース登録事務局

Tel: 06-6879-8634

〒565-0871

大阪府吹田市山田丘 3-2

大阪大学蛋白質研究所

蛋白質データベース開発研究室内