

構造生命科学データクラウドの未来を拓く 序章

創薬等支援技術基盤プラットフォーム・情報拠点
 国立遺伝学研究所
 菅原秀明
 hsugawar@nig.ac.jp

創薬等支援技術基盤プラットフォーム

Platform for Drug Discovery, Informatics, and Structural Life Science (PDIS)

- 文部科学省の補助事業として2012年に発足
- 多数の機関が参画する解析拠点、制御拠点ならびに情報拠点の仮想的3拠点
- 生命科学全分野を対象とする支援と、技術基盤の高度化の2本の柱

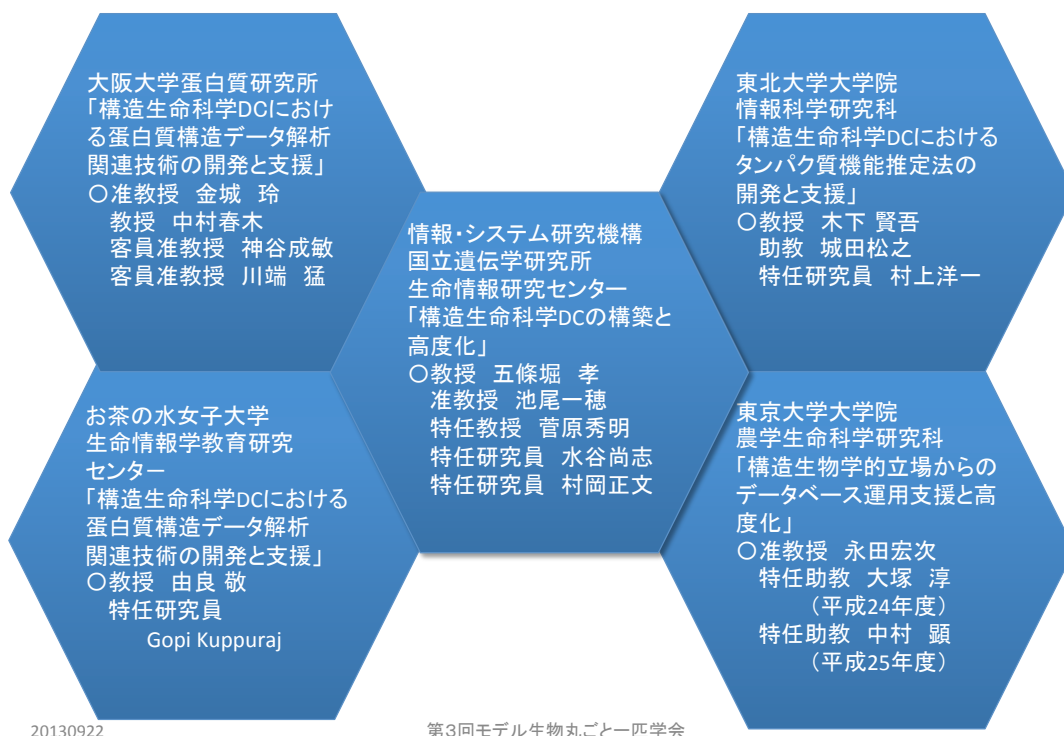


解析拠点情報	制御拠点情報	情報拠点情報
<p>解析拠点は、タンパク質の構造解析に供する試料の調製、タンパク質の立体構造解析及び計算科学を活用したバイオインフォマティクス等に関する技術や施設及び設備等を一貫して提供し、外部研究者等のタンパク質立体構造解析研究を支援します。</p> <p>3領域から構成されます</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ 生産領域：タンパク質試料の調整 ▶ 解析領域：タンパク質構造解析 ▶ バイオインフォマティクス領域：構造予測等の計算化学 	<p>制御拠点は、創薬シーズ等の探索のために、化合物ライブラリーとスクリーニングの技術基盤や施設及び設備等と、化合物の最適化や新規骨格の構築等を行う合成技術の基盤等を一貫して整備して外部研究者等に提供します。</p> <p>2領域から構成されます</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ ライブラリー・スクリーニング領域：化合物ライブラリーの提供 ▶ スクリーニング機器の共有 ▶ 合成領域：ヒット化合物の最適化 	<p>情報拠点は、タンパク3000プロジェクト及びターゲットタンパク研究プログラム並びに平成23年度創薬等支援技術基盤プラットフォームの成果からなるデータベースやソフトウェアを管理・運用します。また、それらを継続的に更新し、内容の拡充や高度化を行います。</p> <p>1領域から構成されます</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ 情報領域：データベース、解析ツールの提供
<p>解析拠点へのお問い合わせ窓口 TEL: 03-5841-5167</p>	<p>制御拠点へのお問い合わせ窓口 TEL: 03-5841-1960</p>	<p>情報拠点へのお問い合わせ窓口 TEL: 055-981-6837</p>



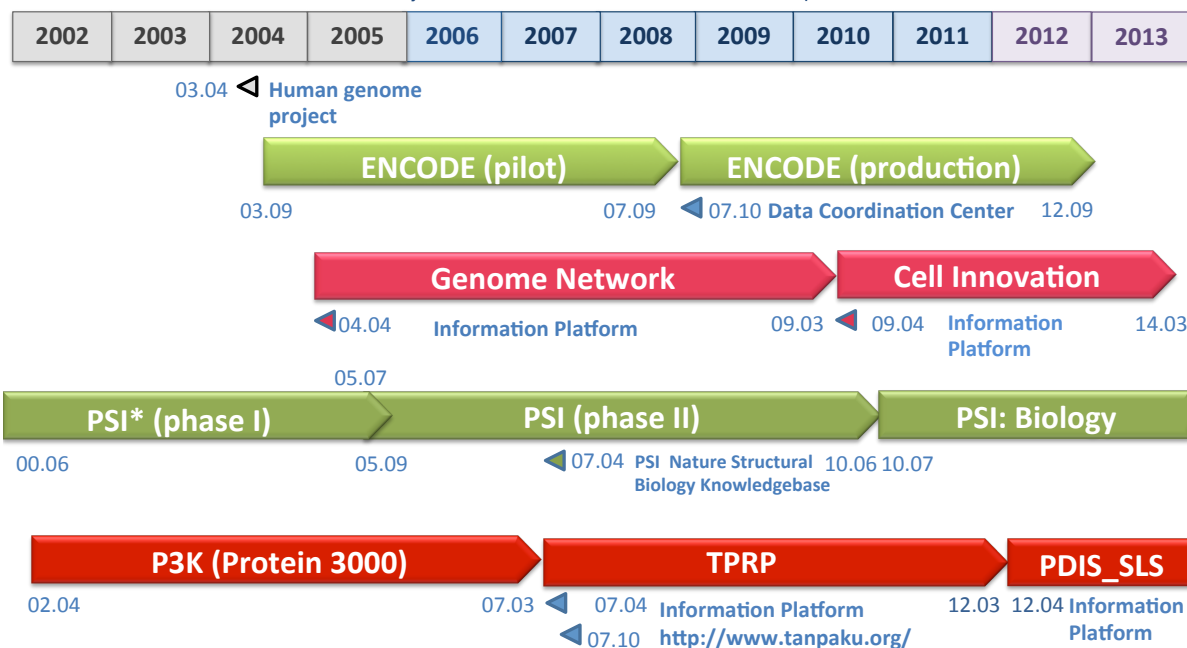
情報拠点実施機関5機関と実施者

(2013年9月時点)



構造生物学プロジェクトから構造生命科学のコンセプトに至るまで

National Projects related to Structural Life Sciences in Japan and US



- PSI: Protein Structure Initiative (US)
- TPRP: Targeted Proteins Research Program
- DDI_SLS: Platform for Drug Discovery, Informatics and Structural Life Science

構造生命科学 (Structural Life Science) のキックオフ

ICSG 2013 JAPAN

Structural Life Science

7th International Conference on Structural Genomics (ICSG2013-SLS)

Sapporo, JAPAN
29th July – 1st August 2013

Scientific Program and Satellite Workshops

- Structural biology and drug development
- Protein expression, purification, crystallography, NMR, and EM
- Hybrid methods and structural analysis of membrane proteins and functional complexes
- Computational approaches to structure, function, and drug discovery
- Impact of structural genomics on medical research and industrial applications

Venue: KEIO PLAZA HOTEL SAPPORO
(2-1 North 5 West 7, Chuou-ku, Sapporo, Hokkaido, Japan)

[ICSG2013 Secretariat]
Laboratory of Biomolecular Science and
Center for Research and Education on Drug Discovery,
Faculty of Pharmaceutical Sciences,
Hokkaido University
Tel: +81-(0)11-706-3764, Fax: +81-(0)11-706-4986
Email: icsg2013@ml.hokudai.ac.jp
URL: <http://www.c-linkage.co.jp/ICSG2013/>

ICSG2013-SLS is organized by the International Structural Genomics Organization (ISGO).

20130922

5

構造生命科学はモデル生物丸ごと一匹学会と共鳴するところが....

「本学会について」より

“この前身の研究会(「高度好熱菌丸ごと一匹プロジェクト連携研究会」)では、モデル生物として高度好熱菌 *Thermus thermophilus* HB8 を利用したシステム生物学的研究に関する情報交換とともに、種々のモデル生物についての情報交換も行ってきました。その過程で、高度好熱菌のような単細胞生物の生命現象は、以前考えられていたよりもはるかに高等動植物と似かよっていることもわかってきました。また、いずれの生物種においても、タンパク質(遺伝子)の1/3-1/2 が「機能未知」の状態に残されており、その状況は生命現象をシステムとして理解する際の障害となっています(倉光成紀(2008) 生化学 80, 1075-1075; (2009) 生産と技術 61, 17-26)。それら機能未知タンパク質(遺伝子)の中で、動植物から微生物まで共通で重要な働きをしていると考えられるタンパク質でさえも、まだ約200種類が機能未知の状態に残されています。それらの機能がいずれかの生物種で分かれば、他の生物種のシステムも理解できるようになります。

それら機能未知タンパク質の機能推定には、立体構造情報が威力を発揮することがわかってきましたが、その他の機能推定法として、ゲノムワイドな機能解析(トランスクリプトミックス、プロテオミックス、メタボロミックスなど)なども利用されています。

一方、タンパク質の立体構造が多くの研究者の協力によって明らかにされた結果、フォールド単位ならタンパク質の立体構造が75%以上予測可能な時代になり(Kaufmann, K. W. et al.

(2010) *Biochemistry*, 49, 2987-2998; Levitt, M (2009) *Proc. Natl Acad. Sci. USA* 106, 11079-11084; CASP9 in 2010 (2011) *Proteins* 79 (suppl. 10) 1-207)、分子の立体構造をもとにして生命現象を化学的に理解できる範囲が、飛躍的に拡大されつつあります。それによって、生命現象をシステムとして原子分解で理解する時代が始まりつつあります。”

-- snip--

20130922

第3回モデル生物丸ごと一匹学会

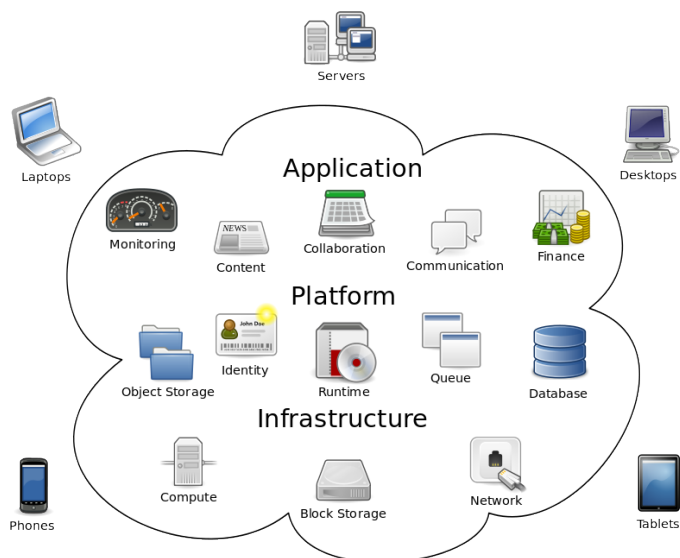
6

クラウドコンピューティング

クラウドコンピューティング(英: cloud computing、または単にクラウドとも)とは、ネットワーク、特にインターネットをベースとしたコンピュータ資源の利用形態である ← 作り手の視点

ユーザーは、コンピュータによる処理やデータの格納(まとめて計算資源という)をネットワーク経由で、サービスとして利用する。

出典
<http://ja.wikipedia.org/wiki/クラウドコンピューティング>



Cloud Computing



Created by Sam Johnston using OmniGroup's OmniGraffle and Inkscape (includes Computer.svg by Sasa Stefanovic)

構造生命科学データクラウド

データクラウドはデータ資源の利用形態 ← (使い手の視点)

コンピュータ資源を意識せずに

- 研究動向や技術を俯瞰できる
- 発想の手がかりを得られる

Q: 大腸菌での発現に行き詰まった!

A: 昆虫細胞、無細胞系、巻き戻し技術などによる成功例をレポート

Q: 希少・難治性疾患Mについてどこまでなが分かっているのか?

A: 疾患Mならびにその類似の疾患について分子機構の解明から薬剤の開発・販売状況までレポート



データクラウド

構造生命科学データクラウドの素材

パブリックな情報資源
独自の情報資源(DBs)

20130922

第3回モデル生物丸ごと一匹学会

9

パブリックな情報資源例 (GeneCards)

The screenshot shows the GeneCards website interface. At the top, there is a search bar and navigation links. The main content area displays the gene TGFBI (transforming growth factor, beta 1) with various data points and navigation options. A callout box labeled "データ カテゴリー" (Data Category) points to the navigation tabs for the gene page, which include: Aliaases, Drugs, Genome view, Pathways, Publications, Databases, Expression, Interactions, Paralogs, Summaries, Disorders, External search, IPIPatients, Products, Transcripts, Domains, Function, Orthologs, Proteins, and Variants.

Category	Number of Genes*	Example Genes
Protein-coding	21882	SOD1, ERBB2, IGF1R, TP53, AKT1, EGFR, KIF, EGFR4, EGFR3, EGFR2, MET, FLT1, FLT3, PDGFRA, BTK, CXCR4, ACP1, ALP, APOE, APOA, APOB, APOC, CD44, CD45, CD44L, CD44V3, CD44V4, CD44V5, CD44V6, CD44V7, CD44V8, CD44V9, CD44V10, CD44V11, CD44V12, CD44V13, CD44V14, CD44V15, CD44V16, CD44V17, CD44V18, CD44V19, CD44V20, CD44V21, CD44V22, CD44V23, CD44V24, CD44V25, CD44V26, CD44V27, CD44V28, CD44V29, CD44V30, CD44V31, CD44V32, CD44V33, CD44V34, CD44V35, CD44V36, CD44V37, CD44V38, CD44V39, CD44V40, CD44V41, CD44V42, CD44V43, CD44V44, CD44V45, CD44V46, CD44V47, CD44V48, CD44V49, CD44V50, CD44V51, CD44V52, CD44V53, CD44V54, CD44V55, CD44V56, CD44V57, CD44V58, CD44V59, CD44V60, CD44V61, CD44V62, CD44V63, CD44V64, CD44V65, CD44V66, CD44V67, CD44V68, CD44V69, CD44V70, CD44V71, CD44V72, CD44V73, CD44V74, CD44V75, CD44V76, CD44V77, CD44V78, CD44V79, CD44V80, CD44V81, CD44V82, CD44V83, CD44V84, CD44V85, CD44V86, CD44V87, CD44V88, CD44V89, CD44V90, CD44V91, CD44V92, CD44V93, CD44V94, CD44V95, CD44V96, CD44V97, CD44V98, CD44V99, CD44V100
RNA genes	70992	ALDH1L1AS2, GC01M000018, GC01M000081, GC01M000145
Pseudogenes	17285	MMP23A, PRKY, GUCY1B2, FMO3B, TAAR3
Genetic loci	761	NA
Gene Clusters	148	PCNA@, PIRCE1, PIRCE10, PIRCE100
Uncategorized	2473	TBR1, TBR1-12, C20orf47, HR231, C18orf12

* Click on the numbers to get to the statistics page, and search the genes within this category

The GeneCards human gene database gene index: 1 3 5 6 A B C D E F G H I J K L M N O P Q R S T U V W X Y Z

20130922

第3回モデル生物丸ごと一匹学会

10

GeneCardsのデータカテゴリーはデータクラウドの 利用者の潜在的観点

The screenshot shows the GeneCards website interface. At the top, there is a search bar with the text "Search by keyword(s) for" and a search button. Below the search bar, there is a navigation menu with options like Home, GeneCards Guide, Suite, Terms and Conditions, About Us, User Feedback, and Mirror sites. A dropdown menu is open, listing various data categories such as Aliases, Summaries, Genome views, Proteins, Protein Domains/Families, Function, Pathways & Interactions, Drugs & Compounds, Transcripts, Expression, Orthologs, Paralogues, Genomic Variants, Disorders/Diseases, Publications, External Searches, Genome Databases showing the gene, Other Databases showing the gene, Specialized Databases showing the gene, Intellectual Property for the gene, and Products. A callout box on the right side of the dropdown menu points to the "データカテゴリー" (Data Categories) section.

20130922

第3回モデル生物丸ごと一匹学会

11

GeneCardsの情報源

GeneCards Sections	Data Sources (情報源ごとに区分表示。ところどころにある数字はGeneCardsの表示画面からその情報源での該当レコードへのリンク。)
Aliases	1HGNC, 2Entrez Gene, 3UniProtKB/Swiss-Prot, 4UniProtKB/TrEMBL, 5OMIM, 6GeneLoc, 7Ensembl/BDM, 8miRBase, and/or 10IRNAdb
Summaries	Entrez Gene, Toris Bioscience, Wikipedia's Gene Wiki, UniProtKB/Swiss-Prot, and/or UniProtKB/TrEMBL
Genome views	GeneLoc and/or HGNC, and/or Entrez Gene (NCBI build 37), and/or miRBase, Genomic Views according to UCSC (hg19) and Ensembl (release 69), Regulatory elements and Epigenetics data according to QIAGEN, SAbiosciences, and/or SwitchGear Genomics
Proteins	1UniProtKB, HORDE, neXtProt, Ensembl, and/or Reactome. Modification sites according to 2PhosphoSitePlus, Specific Peptides from DME, Protein expression images according to data from SPIRE MOPED and PaxDb, RefSeq according to NCBI, PDB rendering according to OCA and/or Proteopedia, Recombinant Proteins from EMD Millipore, R&D Systems, GenScript, Enzo Life Sciences, OriGene, Novus Biologicals, Sino Biological, ProSpec, and/or Uscon, Biochemical Assays by EMD Millipore, R&D Systems, OriGene, GenScript, Cell Signaling Technology, Enzo Life Sciences, and/or Uscon, Ontologies according to Gene Ontology Consortium 01 Mar 2013 and Entrez Gene, Antibodies by EMD Millipore, R&D Systems, GenScript, Cell Signaling Technology, OriGene, Novus Biologicals, Thermo Fisher Scientific, Abcam, and/or Uscon
Protein Domains/Families	InterPro, ProtaNet, UniProtKB, and/or BLOCKS, Sets of similar genes according to GeneDecks
Function	1UniProtKB, GenAtlas, LifeMap Discovery™, iLUMB, and/or 2DME, Human phenotypes from GenomeRNAi, Animal models from MGI Mar 06 2013, inGenious Targeting Laboratory, bound targets from SAbiosciences, miRNA Gene Targets from miRTarBase, shRNA from OriGene, Siron Biotech, RNAi from EMD Millipore, siRNAs from OriGene, QIAGEN, microRNA from QIAGEN, Gene Editing from DNA2.0, Siron Biotech, Clones from EMD Millipore, OriGene, SwitchGear Genomics, GenScript, Sino Biological, DNA2.0, and Vector Biolabs, Cell Lines from GenScript, LifeMap BioReagents, Siron Biotech, In Situ Hybridization Assays from Advanced Cell Diagnostics, Ontologies according to Gene Ontology Consortium 01 Mar 2013 via Entrez Gene.)
Pathways & Interactions	EMD Millipore, R&D Systems, Cell Signaling Technology, KEGG, PharmKB, BioSystems, Reactome, Toris Bioscience, GeneGo (Thomson Reuters), QIAGEN, and/or UniProtKB, Sets of similar genes according to GeneDecks, Interaction Networks according to SAbiosciences, and/or STRING, Interactions according to 1UniProtKB, 2MINT, 3i2D, and/or 4STRING, with links to InAct and Ensembl, Ontologies according to Gene Ontology Consortium 01 Mar 2013 via Entrez Gene
Drugs & Compounds	UniProtKB, Enzo Life Sciences, EMD Millipore, Toris Bioscience HMDB, BitterDB, and/or Novoseek, and Drugs according to DrugBank, Enzo Life Sciences, and/or PharmKB, with drugs/clinical trials/news search links to CenterWatch
Transcripts	Secondary structures according to tRNAdb, GenBank/EMBL/DBJ Accessions according to Unigene (Build 235 Homo sapiens; Mar 10 2013) or GenBank, RefSeq according to Entrez Gene, DOTS (version 10), and/or AceView, transcript ids from Ensembl with links to UCSC, exon structure from GeneLoc, alternative splicing isoforms according to ASD and/or ECGene, RNAi Products from EMD Millipore, siRNAs from OriGene, QIAGEN, shRNA from OriGene, Siron Biotech, microRNA from QIAGEN, Tagged/untagged cDNA clones from OriGene, SwitchGear Genomics, GenScript, DNA2.0, Vector Biolabs, Primers from OriGene, SAbiosciences, and/or QIAGEN)
Expression	RNA expression data according to H-InvDB, NONCODE, miRBase, and RNAdb, Expression images according to data from BioGPS, Illumina Human BodyMap, and CGAP SAGE, Sets of similar genes according to GeneDecks, In vivo and in vitro expression data from LifeMap Discovery™, plus additional links to Genevestigator, and/or SOURCE, and/or BioGPS, and/or UniProtKB, PCR Arrays from SAbiosciences, Primers from OriGene, SAbiosciences, and/or QIAGEN, In Situ Hybridization Assays from Advanced Cell Diagnostics
Orthologs	Orthologs according to 1.2HomoGene (Zoller version, for species not in 1 newer version), 3euGenes, 45GD, 5MGI Mar 06 2013, with possible further links to Flybase and/or WormBase, and/or 6Ensembl pan taxonomic compar., Gene Trees according to Ensembl and TreeFam
Paralogues	Paralogues according to 1HomoGene, 2Ensembl, and 3SIMAP, Pseudogenes according to 4Pseudogene.org Build 68
Genomic Variants	SNPs/Variants according to the 1NCBI SNP Database, 2Ensembl, 3PhapsSUIITE, UniProtKB, and DNA2.0, Linkage Disequilibrium by HapMap, Structural Variations(CNVs/InDels/Inversions) from the Database of Genomic Variants, Mutations from the Human Gene Mutation Database (HGMD) and the Locus Specific Mutation Databases (LSDB), Blood group antigen gene mutations by BGMUT, Resequencing Primers from QIAGEN, Cancer Mutation PCR Assays and Assays and Copy Number PCR Assays from SAbiosciences
Disorders/Diseases	In which this Gene is Involved, According to MalaCards, OMIM, UniProtKB, the University of Copenhagen DISEASES database, Novoseek, GenAtlas, GeneTests, GAD, HuGene Navigator, and/or TGD8.
Publications	In PubMed, Associations of this gene to articles via 1Entrez Gene, 2UniProtKB/Swiss-Prot, 3HGNC, 4GAD, 5PharmKB, 6HMDB, 7DrugBank, 8UniProtKB/TrEMBL, 9 Novoseek, and/or 10IRNAdb)
External Searches	In PubMed, OMIM, and NCBI Bookshelf
Genome Databases showing the gene	According to Entrez Gene, HGNC, AceView, euGenes, Ensembl, miRBase, ECGene, Kegg, and/or H-InvDB
Other Databases showing the gene	According to HUGO
Specialized Databases showing the gene	According to PharmKB, ATLAS, HORDE, IMGT, LEIDEN, UniProtKB/Swiss-Prot, and/or UniProtKB/TrEMBL, Wikipedia and/or GeneReviews via UniProtKB/Swiss-Prot
Intellectual Property for the gene	Patent information from GeneIP, Licensable technologies from WIS Yeda, Salk, Tufts, IP news from LifeMap Sciences, Inc.
Products	Antibodies, recombinant proteins, and assays from EMD Millipore, R&D Systems, OriGene, QIAGEN, GenScript, Cell Signaling Technology, SAbiosciences, Novus Biologicals, Sino Biological, Enzo Life Sciences, Abcam, ProSpec, Uscon, Thermo Fisher Scientific, Gene Editing from DNA2.0 and Siron Biotech, Clones from EMD Millipore, OriGene, GenScript, Sino Biological, DNA2.0, SwitchGear Genomics, Vector Biolabs, Cell lines from GenScript, LifeMap BioReagents, and Siron Biotech, PCR Arrays from SAbiosciences, Drugs and/or compounds from EMD Millipore, Toris Bioscience, and/or Enzo Life Sciences, In Situ Hybridization Assays from Advanced Cell Diagnostics, Animal models from inGenious Targeting Laboratory

20130922

第3回モデル生物丸ごと一匹学会

12



構造生物学のデータベースとツールはこちら

蛋白質の配列・構造・相互作用・解析に関するデータベースとツールを集積し、各サイトに独自にコメントをつけ、サイトの機能によって分類したリンク集です。

目次 [非表示]

1 データベース編

- 1.1 配列から探る
- 1.2 構造を探る
- 1.3 技術を探る
- 1.4 その他の生体高分子は
- 1.5 低分子を巡る
- 1.6 相互作用を探る

2 ツール編

- 2.1 配列をアライメントする
- 2.2 立体構造を入力としてその特徴を分析する
- 2.3 立体構造を表示する
- 2.4 構造を比較する
- 2.5 構造を予測する
- 2.6 相互作用する部位を予測する
- 2.7 ドッキングを予測する
- 2.8 振舞いをシミュレーションする
- 2.9 NMR構造解析を支援する
- 2.10 X線構造解析を支援する
- 2.11 質量分析を支援する
- 2.12 その他
- 2.13 他のサイトをもっと見てみたい

GTOP [🔗](#)

全ゲノム配列が決まった生物種の全ORFのコードするタンパク質の機能と立体構造予測結果をまとめたデータベース。
PDB, SCOP, Prosite, Pfamなどに加え、天然変性（ディスオーダー）領域の情報も提供。
2010年10月版で、1357種のゲノムを収録。

InterPro [🔗](#)

タンパク質の配列にアラインされるSCOP, CATH, Pfam, TIGRFAMs, Prosite, PRINTS, ProDom, SMARTなどのドメインを一括して表示するデータベース。

InterProScan [🔗](#)

利用者が指定したタンパク質の配列についてPfam, TIGRFAMs, PRINTS, ProDom, SMARTなどを一括して検索し、表示する。
立体構造アライメントは出来ず、データベースの選択によっては結果が出るまで長時間かかることがある。

Q-SiteFinder [🔗](#)

タンパク質にプローブ球を転がして、ポケットを同定する。計算結果として、10カ所のポケットをWebブラウザ上で表示してくれる。手元のPDBファイルのポケット同定以外にも、PDBIDにより既知構造のポケットを検索可能。計算する際にPDBファイルに含まれている低分子をどう扱うか選択できる。
利用形態 サーバサイド

eF-surf [🔗](#)

タンパク質の立体構造座標から、分子表面および静電ポテンシャルを計算する。
利用形態 サーバサイド

eF-seek [🔗](#)

クエリーとしたタンパク質のリガンド結合部位と類似した構造を持つタンパク質をeF-siteデータベースから検索する。
利用形態 サーバサイド

Evolutionary Trace Server [🔗](#)

ET viewer、および、ET report_makerにより、PDBに登録されている立体構造アータをもとにして進化トレース法を行った結果を見ることができる。
利用形態 サーバサイド

構造生命科学データクラウドの素材

パブリックな情報資源

独自の情報資源(DBs)



TPRP: TP Atlas of 35 research subjects one by one

Proteolytic system: proteasome (Keiji Tanaka)

TP Atlas HOME

Outline Investigator Proteins Structures Download

20S proteolytic core particles(CP)

POMP	C13orf12, UMP1
PSMG1	C21LRP, DSCR2, ...
Psmg1	Dscr2
PSMG3	C7orf48, PAC3
PSMG4	C6orf86, PAC4
PUP2	DOA5
IRC25	DMP2, POC3
POCA	DMP1

19S regulatory particles(RP)

HSM3	
NAS2	
NAS8	
RRN14	
PAAF1	WDR71
PSMD10	
PSMD5	KIAA0072
PSMD8	
Rpn11	yfb5

Symbol	Synonym	Wiki	FullName	Organism	Entrez	UniProt	GNP	Struct. PDB	Struct. P3K	Struct. TPRP	TP Article	PPI_GNP	PCI
POMP	C13orf12, ...		Proteasome maturation protein	Homo sapi...		Link	Link				Public	Link	
PSMG1	C21LRP, D... DSCR2		Proteasome assembly chaperone 1	Homo sapi...		Link	Link				Public	Link	
Psmg1	Dscr2		Proteasome assembly chaperone 1	Mus musculus	NCBI	Link					Public	Link	
PSMG3	C7orf48, P...		Proteasome assembly chaperone 3	Homo sapi...		Link	Link				Public	Link	
PSMG4	C6orf86, P...		Proteasome assembly chaperone 4	Homo sapi...		Link	Link				Public	Link	
PUP2	DOA5		Proteasome component PUP2	Saccharom...	NCBI	Link		PDB			Public	Link	
IRC25	DMP2, POC3		Proteasome chaperone 3	Saccharom...	NCBI	Link					Public	Link	
POCA	DMP1		Proteasome chaperone 4	Saccharom...	NCBI	Link					Public	Link	
HSM3			DNA mismatch repair protein HSM3	Saccharom...	NCBI	Link					Public	Link	
NAS2			Probable 26S proteasome regulatory subunit p27	Saccharom...	NCBI	Link					Public	Link	
NAS8			Probable 26S proteasome regulatory subunit p28	Saccharom...	NCBI	Link					Public	Link	



TPRP: Protein Experimental Information Management System

PREIMS helps you find a protocol from a list or search by key word(s)/protocol ID

Protocol List

375 records

Protocol ID	Protocol Name	Category	History	Author	Last update
F002AAA000215	Plasmid_construction_of_gFP8-1	PCR	Input_by_J.Sato_on_2009...	Nagata_A_et_al	20100901
F002AAA000089	Construction_of_M13_phage_display_lbr...	PCR	Input_by_J.Sato_on_2011...	Sato_Takashi_et_al	20110121
F002AAA000098	RT-PCR_of_Gb-mTPI	PCR	Input_by_J.Sato_on_2009...	Yoriko_Sawano_et_al	20100801
F002AAA000087	Construction_of_Expression_Vector_of...	PCR	Input_by_J.Sato_on_2009...	Yoriko_Sawano_et_al	20100801

Search

Protocol ID: Search

Category: Search

Keyword: Search

Protocol ID: Search

231 records

Protocol ID	Protocol Name	Category	History	Author
F004AAA0000107	Expression_of_SecDF_P4_domain	Expression	Input_by_J.Sato_on_2011...	Tomoya_Tsu
F004AAA0000382	Expression_of_TnT	Expression	Input_by_J.Sato_on_2009...	Keriji_Murak
F004AAA0000422	Expression_of_N-terminal_198-residue_p...	Expression	Input_by_J.Sato_on_2010...	Masamichi_J
F004AAA0000540	Expression_of_proteins_with_N-terminal...	Expression	Input_by_J.Sato_on_2010...	Teraoka_N

Protocol

Protocol ID: F004AAA0000107

Protocol Name: Expression_of_SecDF_P4_domain

Category: Expression

History: Input by J.Sato on 2011.05.30

Author: Tomoya Tsukazaki et al

Last update: 2011/05/30

Goal: To express membrane protein

Reference: Tomoya Tsukazaki, Hiroyuki Mori, Yuka Echizen, R & Osamu Nureki, Structure and function of a mer

PDB ID: [2zrm](#)

PUBMED ID: [21562494](#)

UniProt ID: [Q5SKE6](#)

Description: The plasmid encoding the P4 domain, Met-TSecE BL21-codon Plus (DE3) RIL (Stratagene) cells, wh 15NH4Cl, 0.4% 13C-glucose, 1 mM MgSO4, 2 mg the P4 domain was then induced with 1 mM IPTG

Hozo File: [F004AAA0000107.htm](#)

rdf File: [F004AAA0000107.rdf](#)

Attachment File

Subprotocol

Subprotocol ID: S004AAA0016971

Subprotocol Name: cloning_SecDF_P4

Protein ID

Goal: To clone gene encoding target domain

History: Input by J.Sato on 2011.05.30

Author: Tomoya Tsukazaki et al

Last update: 2011.05.30

Reference: Tomoya Tsukazaki, Hiroyuki Mori, Yuka Echizen, R & Osamu Nureki, Structure and function of a mer

Description: The plasmid encoding the P4 domain, Met-TSecE BL21-codon Plus (DE3) RIL (Stratagene) cells.

Profile of Ontology: [Display Subprotocol Profile](#)

Flowchart:

```

    graph TD
      A[cloning_SecDF_P4] --> B[buffer_preparation_SecDF_P4]
      B --> C[expression_by_ETC_SecDF_P4]
      C --> D[cell_disruption_SecDF_P4]
  
```




eSOL Solubility database of all *E. coli* proteins

eSOL(Solubility database of all *E. coli* proteins)は、再構築型の試験管内タンパク質合成系を用いて、大腸菌の全てのタンパク質を発現させた際の凝集の度合い(可溶性)と合成量をまとめたデータベースです。

ホーム キーワード検索 遺伝子名一覧検索 ダウンロード リンク

お知らせ

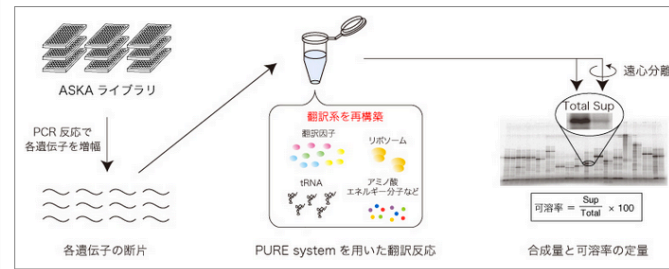
2012.05.02

- ・ eSOLデータベースのエントリーのうち、788個の凝集性タンパク質に対する分子シャペロンの凝集抑制効果データが追加されました。
- ・ 項目検索機能が追加されました。また、項目の組み合わせ検索も可能となりました。

概要

このデータベース(eSOL)は、ターゲットタンパク質研究プログラム技術開発分野生産領域の東京大学上田研究室が再構築型の試験管内タンパク質合成系を用いて、大腸菌の全てのタンパク質を発現させた際の凝集の度合い(可溶性)と合成量の実験結果を網羅しています。データベースの仕組みは同じくターゲットタンパク質研究プログラム技術開発分野の情報プラットフォームが用意し、遺伝子名またはクローンID(JW ID)から各タンパク質の実験結果を検索することができます。

実験の手法としては、まず、奈良先端科学技術大学院大学バイオサイエンス研究科森研究室で構築された大腸菌の全遺伝子のライブラリーであるASKAライブラリーのプラスミドからPCR反応によって各遺伝子断片を増幅します。次に、増幅した遺伝子断片から、再構築型の試験管内タンパク質合成系であるPURE systemを用いてタンパク質を合成させます。反応後、一部を分取(Total)した後、残りを遠心し(20,000xG、30分)、上清を回収します(Sup)。こうして得られたTotalとSupをそれぞれSDS-PAGEで分離し、合成されたタンパク質量及び遠心で上清に残った割合(可溶性)を計算します。以下に手順の模式図を示します。



20130922

17



AUTOPHAGY DATABASE

TOP Overview New Refs Protein List Homologs Keyword Search Homology Search Original Analyses Help TPRP

List of autophagy-related proteins and 3D structures

Select an organism:

Saccharomyces cerevisiae (baker's yeast)

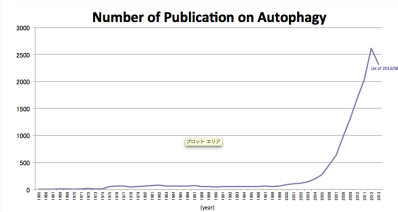
Get information on:

- Synonyms Gene name Gene ID Protein GI Protein Accession Description CASA db
- Location Complex Interaction Disorder

search reset select all

	Drosophila melanogaster (fruit fly)	Homo sapiens (human)	Mus musculus (mouse)	Saccharomyces cerevisiae (baker's yeast)
Protista	<i>Dictyostelium discoideum</i> AX4	<i>Leishmania major</i> strain Friedlin	<i>Trypanosoma brucei</i>	
Fungi	<i>Ashbya gossypii</i> Ashbya gossypii ATCC 10895	<i>Aspergillus fumigatus</i> Aspergillus fumigatus AT293	<i>Aspergillus nidulans</i> Aspergillus nidulans FGSC A4	<i>Candida albicans</i> Candida albicans SCS314
Plantae	<i>Arabidopsis thaliana</i> (thale cress)	<i>Oryza sativa</i> (rice)	<i>Physcomitrella patens</i> (moss)	<i>Populus trichocarpa</i> (black cottonwood)
Invertebrata	<i>Aedes aegypti</i> (yellow fever mosquito)	<i>Anopheles gambiae</i> (mosquito)	<i>Apis mellifera</i> (honey bee)	<i>Bombyx mori</i> (silkworm)
Chordata	<i>Branchiostoma floridae</i> (lancelet)	<i>Danio rerio</i> (zebrafish)	<i>Gallus gallus</i> (chicken)	<i>Gasterosteus aculeatus</i> (threespine stickleback)
Mammalia	<i>Bos taurus</i> (cow)	<i>Canis familiaris</i> (dog)	<i>Cavia porcellus</i> (guinea pig)	<i>Dasyprocta novemcinctus</i> (armadillo)

Code	Status	Function	Cluster	baker's yeast	Trypanosoma brucei	Schizosaccharomyces pombe
1	reverse	Atg1 kinase and its regulators	ATG1	TR927_3.3150	ATG1	CAS2033.1
2	orthologous		S00000148	TR927_8.870	CAS2033.1	CAS2032.1
3	homologous		ATG13	S000001240	AP013	CAS9901.1
13			S000001096	S000004710	CAS1730.1	CAS5305.1
			S000006389	S000006389	CAS76216.1	CAS76216.1
17			ATG12	S000004415	SPAC106.11C	
29			ATG29			
21			ATG21			
5			ATG6	S000005443	CAS0804.2	
			VPS30			
14			ATG14	S000003332		
29			S000003092	SNE1	CAN0972.4	CAN1762.1
			VPS16		TR11.01.0930	PKC19



20130922

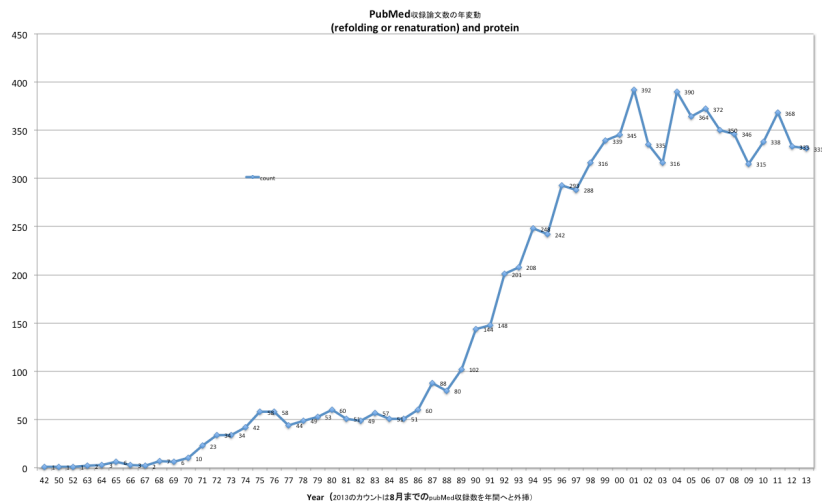
第3回モデル生物丸ごと一匹学会

18



情報拠点：巻き戻し技術データベース

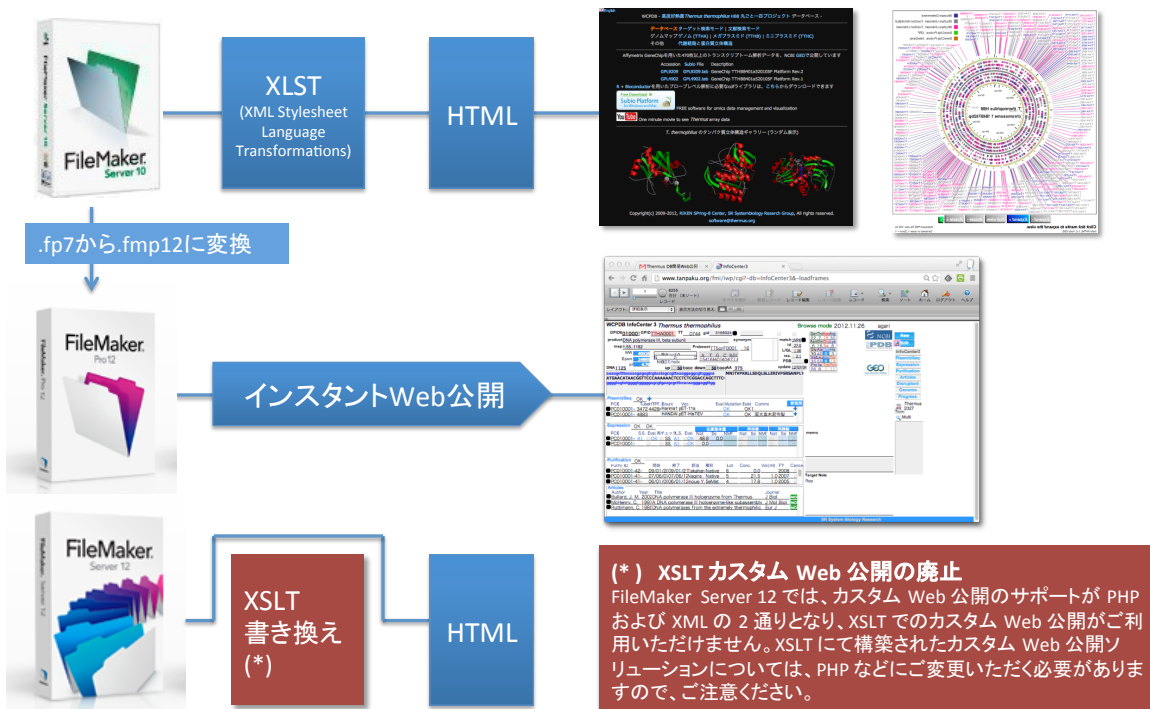
- 情報源：論文



- データ項目：Title, URL, protein names in the article/in UniProt, amino acid sequence, UniProt ID, Function, Domain, refolding method, pH, temperature °C, validation, Notes Methods (copy & paste)



Thermus DB再現状況 (お茶の水女子大学由良教授と共同で試行中)





使い方

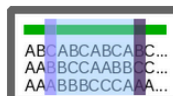
Step1.タンパク質のアミノ酸配列入力

タンパク質のアミノ酸配列を一文字表記で入力する。タンパク質の属する種の種類と、保存領域決定に使うホモログ数を指定する。

Step 1 Seq input

Step2.ホモログ検索と保存領域決定

ホモログが検索され、立体構造アラインメントのある部分と保存領域が画面に表示される。保存領域の決定に用いるホモログは利用者が任意に変更し、保存領域を再計算させることができる。保存領域自体も任意に変更可能である。



Step 2 Cons region

Step3.タンパク質の一次構造表示

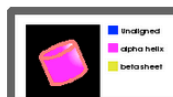
立体構造(PDB, SCOP)アラインメントが、左(N端)から右(C端)に直線的に表示される。また、Pfam, SMARTドメインアラインメント、タンパク質の保存領域、不規則領域(disorder)・SEG・コイルドコイル予測、シグナル配列・膜貫通領域・細胞内局在の予想、自動機能予測も同じ画面に示される。



Step 3 1D display

Step4.タンパク質の立体構造表示

立体構造に対するアラインメントがあれば、それぞれのPDB構造に対するアラインメントが立体的に表示される。アラインメントのない領域、PDB構造中のギャップ、分子の内側・外側の区別、保存領域も表示される。



Step 4 3D display

Thermus DB再公開ならびに
構造生命科学データクラウドの公開までしばらくお待ちください。
(2013年9月時点)

