

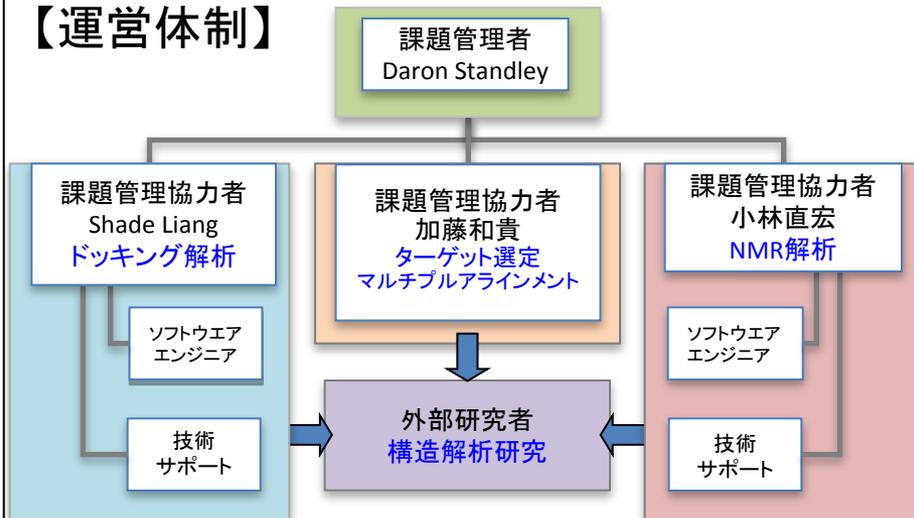
解析拠点
バイオインフォ
マティクス領域

課題名 実験データを取り入れたフレキシブルドッキングによるタンパク質
複合体解析パイプラインの構築、支援と高度化
大阪大学免疫学フロンティア研究センター (Daron Standley)

【課題概要】

NMRデータ、SAXSなどの実験データを束縛条件として、独自に開発したsurFitによるドッキング技術を含むタンパク質複合体パイプラインを構築する。高度な専門知識を持たない初学者にも取り組みやすく設計する一方、優れた解析精度を持つシステムとして高度化していく

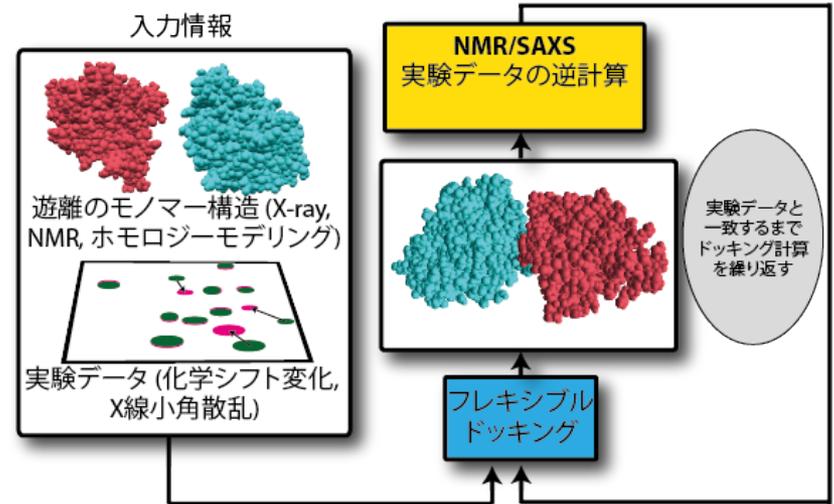
【運営体制】



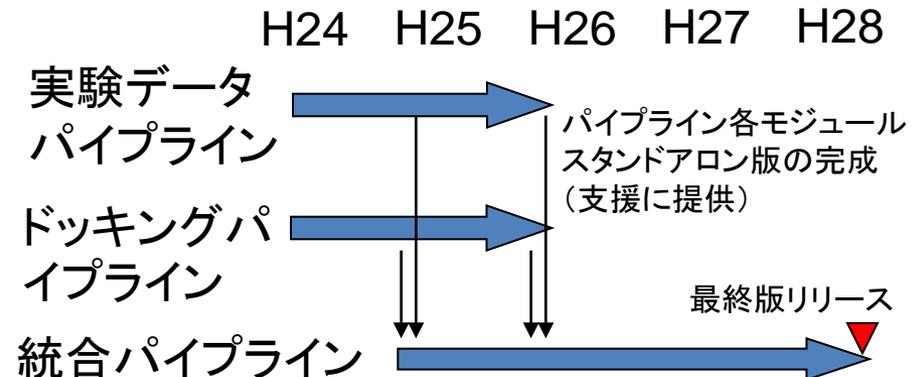
【連絡先】

大阪大学免疫学フロンティア研究センター
Daron Standley、Tel: 06-6879-4917
e-mail: standley@IFReC.osaka-u.ac.jp

【支援に供する技術】



【高度化研究】



これまでの支援事例

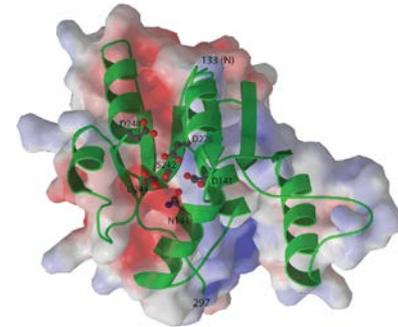
免疫学

タンパク質ターゲット
の選定
SNPsによる変異情報

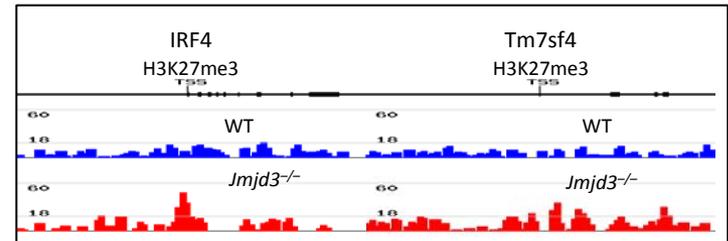
バイオインフォマティクス
Sequence Alignment
ホモロジーモデリング
ドッキング計算

構造生物学

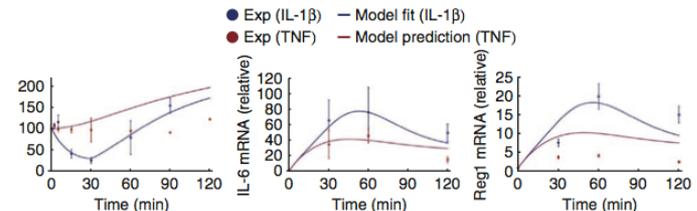
NMR
SAXS
Yeast two-hybrid



Zc3h12a is an RNase essential for controlling immune responses by regulating mRNA decay
Nature 2009, **458**:1185-1190



The Jmjd3-Irf4 axis regulates M2 macrophage polarization and host responses against helminth infection
Nat Immunol 2010, **11**:936-944



The IkappaB kinase complex regulates the stability of cytokine-encoding mRNA
Nat Immunol 2011, **12**:1167-1175.

対応すべき課題

構造生物学

NMR
SAXS
Yeast two-hybrid

バイオインフォマティクス

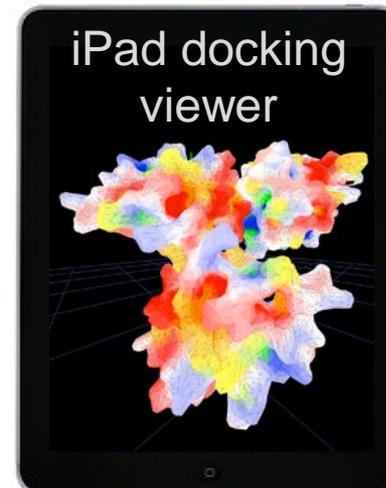
Sequence Alignment
ホモロジーモデリング
ドッキング計算

- 実験データと理論値の情報量としてのバランスをいかに効果的に調整すべきか
- ユーザーフレンドリーなパイプラインとして方法論を統合していく

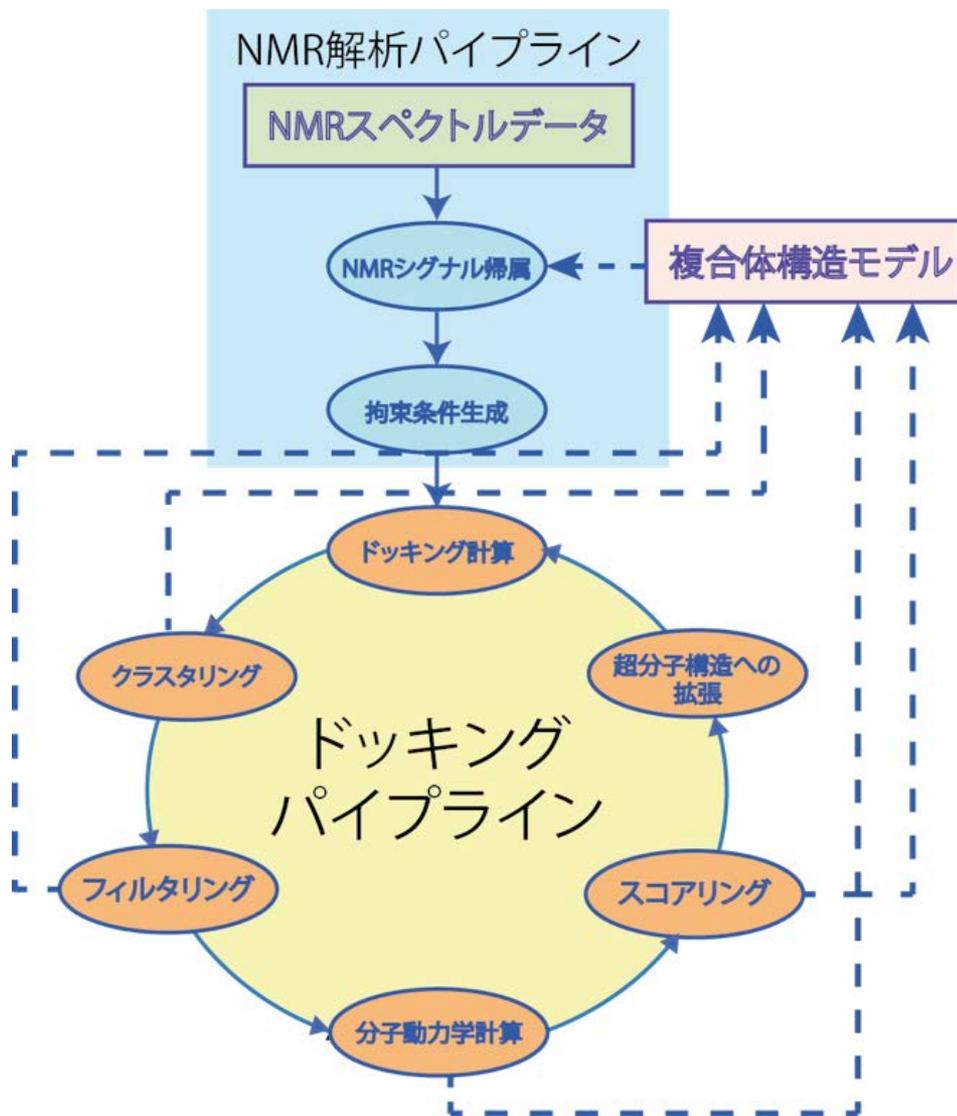


Input two PDB identifiers (or upload the PDB-formatted coordinates) and specify the chain names

First PDB ID	<input type="text"/>	or <input type="button" value="Choose File"/>	no file selected	Chain	<input type="text" value="A"/>	(required)
Second PDB ID	<input type="text"/>	or <input type="button" value="Choose File"/>	no file selected	Chain	<input type="text" value="A"/>	(required)
email address	<input type="text"/>					
Confirm	<input type="text"/>					



高度化における開発方針



- 束縛条件検討における生データの解析を自動化する
- 構造モデルから予測される理論値をフィードバックしてモデルをさらにリファインする