

# 複合体立体構造の検索・モデリング

## [技術の概要]

### HOMCOS (<http://homcos.pdbj.org>)

- ・PDB内の複合体の立体構造データを検索し、それを鋳型にモデリング。検索にはBLAST (アミノ酸配列)とKCOMBU(化合物)を使用。

サービス	HOMCOS	入力1	入力2
PDB内の結合分子の検索	タンパク質に対する結合分子の検索	アミノ酸配列	
	化合物に対する結合分子の検索	化合物構造	
複合体立体構造のホモロジーモデリング	ホモ多量体モデル	アミノ酸配列	
	ヘテロ多量体モデル	アミノ酸配列A	アミノ酸配列B
	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

## [技術の利用例]

- ・1本のアミノ酸配列から、そのホモログが結合している結合分子(別のタンパク質、核酸、低分子化合物)のリストをまとめて表示(結合分子予測)。結合部位の情報もまとめて表示できる。(結合部位予測 ⇒ 変異解析に有効)
- ・2本のアミノ酸配列や、化合物とアミノ酸配列から、相同な複合体構造を検索できる。
- ・検索した相同複合体を鋳型としたモデリングも可能。簡易モデリング構造のPDBファイルか、Modellerスクリプトをダウンロードできる。

### 連絡先

[所属] 大阪大学蛋白質研究所

[名前] 川端 猛

[E-mail] kawabata@protein.osaka-u.ac.jp

