

平成21年度科学研究費補助金実績報告書（研究実績報告書）

1. 機関番号 1 4 6 0 3 2. 研究機関名 奈良先端科学技術大学院大学

3. 研究種目名 基盤研究(C) 4. 研究期間 平成19年度～平成21年度

5. 課題番号 1 9 5 0 0 2 5 5

6. 研究課題名 遷移金属を結合するタンパク質の探索と機能予測

7. 研究代表者

研究者番号	研究代表者名	所属部局名	職名
2 0 2 1 2 0 9 5	フリガナ ナカムラ ケンスケ 中村 建介	情報科学研究科	特任准教授

8. 研究分担者(所属研究機関名については、研究代表者の所属研究機関と異なる場合のみ記入すること。)

研究者番号	研究分担者名	所属研究機関名・部局名	職名
	フリガナ		
	フリガナ		
	フリガナ		
	フリガナ		
	フリガナ		

9. 研究実績の概要

下欄には、当該年度に実施した研究の成果について、その具体的内容、意義、重要性等を、交付申請書に記載した「研究の目的」、「研究実施計画」に照らし、600字～800字で、できるだけ分かりやすく記述すること。また、国立情報学研究所でデータベース化するため、図、グラフ等は記載しないこと。

金属イオン結合タンパク質はすべてのタンパク質のうちの3分の1から半数程度を占めるとされており、近年その重要性が広く認識され、メタロームあるいはメタボロームという新しい研究分野をも出現しつつある。こうした状況で金属イオンタンパク質に関するバイオインフォマティクスリソースの必要性が指摘されているなか(1)、本研究費によって一昨年度より申請者が構築を進めてきたタンパク質の金属イオン結合部位のデータベースとしてMetalMine (<http://metalmine.naist.jp/>)を構築しWeb上で公開することができた(2)。

MetalMineはPDBデータベースに含まれるタンパク質の金属イオン結合サイトに関する情報を網羅的に含んでいる。また、結晶化のために加えられた塩などによる人工的な金属イオンの配位を、文献データを参照することで可能な限り排除し、生体内で実際に機能に関与していると考えられる結合サイトのみを収集した。検索機能としてPDB-ID、タンパク質名などによるキーワード検索の他、BLASTによる配列探索機能があり、アミノ酸配列からの相同性による簡便な金属結合残基予測として用いることもできる。現時点で主要な8種の遷移金属イオン(Co, Cu, Fe, Mn, Mo, Ni, V, W)に関する配位部位412種(7917サイト)を含んでおり、公開されている金属イオン結合サイトのデータベースとしては、世界的にみても最大規模のものとなっている。

(1) Andreini, C., Bertini, I., Cavallaro, G., Najmanovich, R.J., Thornton, J.M., J. Mol. Biol., 388, pp. 356-380 (2009)  
 (2) Nakamura, K., Hirai, A., Md. Altaf-Ul-Amin, Takahashi, H., Plant Biotech., 26, pp. 517-521 (2009)

10. キーワード

- |               |            |             |
|---------------|------------|-------------|
| (1) 金属結合タンパク質 | (2) ゲノム    | (3) 生命情報学   |
| (4) メタロミクス    | (5) 分子進化   | (6) 遷移金属イオン |
| (7) 配列解析      | (8) データベース | (裏面に続く)     |

11. 研究発表（平成21年度の研究成果）

〔雑誌論文〕 計（ 3 ）件    うち査読付論文 計（ 3 ）件

著者名		論文標題			
K.Nakamura, A.Hirai, Md.Altaf-UI-Amin, H.Takahashi		MetalMine: a database of functional metal-binding sites in proteins			
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	
Plant Biotechnology	有	26	2009	517~521	

著者名		論文標題			
K.Tanaka, K.Nakamura, T.Saito, H.Osada, A.Hirai, H.Takahashi, S.Kanaya, Md. Altaf-UI-Amin		Metabolic pathway prediction based on inclusive relation between cyclic substructures			
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	
Plant Biotechnology	有	26	2009	459~468	

著者名		論文標題			
K.Nishikata, M.Wada, H.Takahashi, K.Nakamura S.Kanaya,Md.Altaf-UI-Amin		Predicting conformation of protein complexes by determining statistically significant domain-domain interactions			
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	
Plant Biotechnology	有	26	2009	495~501	

〔学会発表〕 計（ 2 ）件    うち招待講演 計（ 0 ）件

発表者名		発表標題		
K.Nakamura, A.Hirai, H.Takahashi, Md.Altaf-UI-Amin, S.Kanaya		MetalMine: a database of functional metal-ion-binding sites in proteins		
学会等名	発表年月日	発表場所		
The 20th International Conference on Genome Informatics	2009年12月15日	パシフィコ横浜（神奈川県）		

発表者名		発表標題		
K.Nakamura, A.Hirai, H.Takahashi S.Kanaya		Metalome in coordination with Metabolome		
学会等名	発表年月日	発表場所		
8th Metabolome Informatics Workshop	2010年1月29日	慶応義塾鶴岡キャンパス(山形県)		

〔図書〕 計（ 0 ）件

著者名		出版社		
書名		発行年	総ページ数	

12. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

〔出願〕 計（ 0 ）件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	出願年月日	国内・外国の別

〔取得〕 計（ 0 ）件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	取得年月日	国内・外国の別

13. 備考

※ 研究者又は所属研究機関が作成した研究内容又は研究成果に関するwebページがある場合は、URLを記載すること。

http://metalmine.naist.jp/	MetalMine: タンパク質-金属イオン結合サイトデータベース
----------------------------	-----------------------------------