

独立行政法人科学技術振興機構  
バイオインフォマティクス推進センター事業

生命情報データベースの高度化・標準化

第Ⅱ期 研究開発課題

(追跡調査報告書)

研究開発課題：蛋白質構造データバンクの国際的な構築と高度化

(PDBj)

(平成18年4月～平成23年3月)

代表研究者氏名：中村 春木

(大阪大学蛋白質研究所 教授)

# 目次

## 本編

1. 研究開発による成果.....	1
1.1. 研究開発課題の目標及び新規性・独創性 .....	1
1.2. 研究開発開始時の課題を取り巻く研究・技術水準及び分野における 課題の位置づけ .....	1
1.3. 研究開発終了時の成果概要 .....	2
1.4. 研究開発の達成度 .....	3
2. 研究開発による成果の活用状況や発展状況.....	3
2.1. 構築されたデータベース・ソフトウェア等の活用状況.....	3
2.1.1. データベース・ソフトウェア等の継続状況や発展状況 .....	3
2.1.2. 第三者によるデータベース・ソフトウェア等の活用事例 .....	6
2.1.3. データベース・ソフトウェア等へのアクセス数/ダウンロード数、visit 数	11
2.2. 課題終了後の研究開発成果の継続状況や発展状況.....	12
2.2.1. BIRD 終了から現在まで、BIRD で取り組んだ課題に関連した研究開発成果の 継続状況や発展状況（国内外の研究者との共同研究へ発展した等） .....	12
2.2.2. BIRD 終了後に発表された論文リスト.....	12
2.2.3. 研究開発成果の現在の国際的な評価・位置づけ .....	13
2.3. 現在の科学技術研究における研究開発成果の活用状況、発展状況のまとめ.....	14
3. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果.....	14
3.1. バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献.....	14
3.1.1. バイオインフォマティクス分野の研究への貢献 .....	14
3.1.2. ライフサイエンス分野（バイオインフォマティクス以外）や その他、科学技術分野の研究への貢献 .....	15
3.2. 人材育成の面から参加研究者の活動状況 .....	15
3.2.1. 研究開発に参加した研究者のキャリアアップ .....	15
3.3. 社会的及び経済的な効果 .....	15
3.3.1. 研究開発成果が大学や公的研究機関、企業等で、応用に向けて 継承または発展した例 .....	15
3.3.2. その他、研究開発成果が社会的、経済的な効果・効用につながる兆し、 可能性 .....	16

## 資料編

1. 論文リスト .....	17
2. 主要論文の被引用回数.....	24

3.	学会招待講演・基調講演.....	28
4.	新聞発表等 .....	32
5.	特許出願・成立 .....	32
6.	学会賞等の受賞 .....	32
7.	グラントの獲得実績.....	33
8.	書籍等の執筆実績 .....	33
9.	総説の執筆実績 .....	33
10.	参加研究者の活動状況.....	34

本調査報告書は平成 26 年 4 月に作成  
表紙の代表研究者所属は平成 25 年 10 月時点

## 1. 研究開発による成果

### 1.1. 研究開発課題の目標及び新規性・独創性

欧米・日本を中心とする国際的な構造ゲノムプロジェクトの進展・成熟によって、蛋白質・核酸等の生体高分子の立体構造が、従来に比べて迅速に決定される時代を迎えている。PDB (Protein Data Bank) では、これらの中で決定された生体高分子の立体構造を登録し、無償で公開している。これまで日本蛋白質構造データバンク (PDBj) を組織し、米国および欧州と協力して国際蛋白質構造データバンク (wwPDB) を設立し、国際協力による PDB データバンクの構築・維持・管理・標準化とサービス・システムの開発を進めてきたが、本研究開発はこの人類全体の貴重なデータベースである PDB の品質を保ちつつ、さらに大量のデータの登録・編集とその維持・管理・標準化を国際協力のもとに行うことを目的とした。また、核磁気共鳴実験、電子顕微鏡、計算機シミュレーションによるモデル等の新たなデータベースの構築も進め、さらに、グリッドやオントロジーの技術も積極的に活用して、通常行われるテキストベースの検索に加え、蛋白質の骨格や分子表面の形状などのアナログ情報の検索を高速に可能とするシステムを実現することを目指した。

### 1.2. 研究開発開始時の課題を取り巻く研究・技術水準及び分野における課題の位置づけ

本研究開発の課題、「生命情報データベースの高度化・標準化」の第 I 期が 2001 年から 2006 年にわたって実施された。PDBj は開始時点では海外で構築された構造データを配布するだけの役割であったが、第 I 期期間中には、国際蛋白質構造データバンク (wwPDB) の設立など、米国および欧州と協力した国際的な役割を担うと同時に、増大する蛋白質構造データの登録、データベースの標準化記述法の開発や、蛋白質構造を基にした解析システム開発、二次データベースの開発など、蛋白質データベースの基盤の整備に大きな役割を果たすようになった。また、国際蛋白質構造データバンク (wwPDB) の委員会を開催するなどの国際活動、広報活動、教育活動など幅広い活動を通して、PDBj は米国や欧州と並ぶ PDB の主要な一員としての地位を確かなものにしてきた。第 II 期は、さらに増大する NMR による解析データを含めた蛋白質構造データの登録を進めるとともに、データベースの質の維持、向上を図ること自体が重要な課題であった。また、電子顕微鏡構造の閲覧サイト (EM Navigator) の開発など PDBj のデータバンクとしての高度化へ向けての多くの課題があった。この過程でタンパク 3000 プロジェクトやターゲットタンパク研究プロジェクトなどのいわゆる構造ゲノム科学プロジェクトの成果として、蛋白質構造解析を高度化するためのロボット技術やビームライン、NMR 技術の開発・整備等が行われ、それ以前に比べて、格段に構造解析のスピードが増し、蛋白質の構造データ量は大幅に増加した。それに対応するため本研究開発では、国際協力によってアノテーションを迅速に行う仕組みを開発し、ほぼ同数のアノテータでデータ量の増加にも対処することを可能とした。同時

に、整備されてきた PDBj を基盤とし、さらに検索、解析の機能など付加価値を与え、高度化することを主眼としたデータベースやソフトウェアの研究開発が行われた。

### 1.3. 研究開発終了時の成果概要

wwPDB はデータベースであり、研究者が決定した蛋白質や核酸等の生体高分子立体構造のデータが、wwPDB の各メンバーに提出され、アノテータによって品質管理を行いながら登録業務がなされる。PDBj による登録処理件数は、2006 年から 2010 年 12 月末までの期間で 10,450 件であり、wwPDB による世界全体での登録処理件数 (39,838 件) の 26.2% であった。また、PDBj からの立体構造データファイルのダウンロード数は 2006 年度の 6,142,469 件に対し、2010 年度 (4-12 月) では 15,952,441 件と増大した。同様に検索数も 2006 年度の 330,141 件から 2010 年度 (4-12 月) 1,913,913 件と大幅に増加した。

NMR 化学シフト情報等のデータを収集している米国 BMRB との連携し、PDBj-BMRB グループを PDBj 内に組織して、NMR 実験データベースの構築・維持・管理を推進した。PDBj-BMRB グループでは、この期間の NMR 化学シフトデータの総登録件数は 628 件であり、BMRB 全体 (3,536 件) の 17.8% であった。また、wwPDB では構造の登録時に NMR 化学シフト情報の登録が必須となったため、同時に 2 種類の情報が登録される仕組み (ADIT-NMR) を PDBj 内に構築し対応した。また、PDB で受け入れできない低分子量生体分子の NMR 構造データベース (SMSDep) の座標データを編集する体制を 2010 年中に整え、2011 年 2 月 1 日までに 111 件のデータ編集を行った。

一方、基盤となるデータベースである PDBj に加え、蛋白質フォールド (ASH)、機能部位の原子配置 (GIRAF)、分子表面構造 (eF-site, eF-seeK) などのアナログ的な検索手法を独自に開発し、さらに配列情報を加えて蛋白質の分子機能を推定する MAFFTash、SeSAW も開発し、タンパク 3000 等のプロジェクトによって立体構造が決定された機能未知の蛋白質について、立体構造から網羅的に機能を推定する研究を行った。また、マイクロアレイ解析実験で発見された新たな蛋白質の機能推定に成功し、リガンド分子認識や蛋白質間相互作用のための共通な部分構造モチーフの同定の研究も実施され、新たな知見が得られた。

さらに蛋白質ダイナミクス・データベース (ProMode) では、複数分子の場合に対応する ProMode-Oligomer や、弾性ネットワークモデルに基づく ProMode-Elastic を開発・追加し、2010 年 12 月末時点で 4,651 項目を公開した。また、3 次元電子顕微鏡構造閲覧サイト (EM Navigator) を開発し、2010 年 12 月末までに EMDB の全データ 1,349 件を、新たに開発した Yorodumi ポータルから公開した。蛋白質構造百科事典、eProtS では、350 項目の蛋白質とその構造について平易な解説を記載し、教育・普及活動も進めた。

## 1.4. 研究開発の達成度

本研究開発の当初の目標は、「国際協力のもと、データ品質を保ちつつ、さらに大量のデータの登録・編集とその維持・管理・高度化を進める一方、NMR データ、電子顕微鏡画像、理論モデル等の新たなデータベース構築を進め、グリッド技術も積極的に活用して、蛋白質の骨格や分子表面の形状などのアナログ情報検索も高速稼働させること」であった。

まず、国際分担機能については、wwPDB のデータが示す通り、5 年間で世界全体の 26% にあたる 10,450 件の構造データの品質管理を保ちつつ登録・編纂を行った (<http://www.wwpdb.org/stats.htmlpdb>)。また新たな登録システム構築やフォーマットの策定を積極的に進め、新しい統合データベースの構築に向けて貢献した。中でも native XML-DB システムが期待されていたほど発展しなかったため、PDBML 書式を用いた新しい独自の検索システム (PDBj Mine) を開発したことは当初計画されていなかったものであり、期待以上の成果といえる。NMR データの登録については新たなソフトウェアの開発や理研との協力によりタンパク 3000 プロジェクト等で増大する NMR 立体構造の登録を円滑に行うことに成功している。また、3 次元電子顕微鏡構造閲覧サイト (EM Navigator) の開発を行い、EMDB および PDB の 3 次元電子顕微鏡構造の全データが閲覧できるようになった。

一方では、蛋白質の立体構造の検索、予測を行うためのデータベース、ソフトウェアが開発され公開された。蛋白質フォールド (ASH)、機能部位の原子配置 (GIRAF)、分子表面構造 (eF-site, eF-seeK) などのアナログ的な検索手法の開発、配列情報から蛋白質の分子機能を推定する MAFFTash、SeSAW などがそれである。このような新たな試みにより PDBj は単なる高度な構造データベースから、一次構造－立体構造－機能をつなげる新しい統合型のデータバンクへ進化した。本研究開発期間が終了した後、現在に至るまで、このような各種のデータベース・ソフトウェアが現在も維持され管理され、様々な分野で活用され続けていることから、終了時において当初の目標は十分達成された。

## 2. 研究開発による成果の活用状況や発展状況

### 2.1. 構築されたデータベース・ソフトウェア等の活用状況

#### 2.1.1. データベース・ソフトウェア等の継続状況や発展状況

本研究開発課題終了時に公開されていた大部分のサイトは現在も公開され、利用されている。また、それぞれのデータベースにおいて次表に示したように、海外の各 PDB サイトとの連携による PDB 自体の高度化、効率化が継続的に図られている。また、BIRD 第 II 期で開発された各種データベースやプログラムもさらに改良がなされ、継続的な運用が行わ

れている。一般に向けた Viewer の改良や「今月の分子」の日本語版の継続的な公開など、PDBj の発展に向けた総合的な開発が続けられている。

	ツール名	URL	公開状況	備考
1	PDBj 検索結果ページ (xPSSS/ PDBj-Mine)	http://pdbj.org	公開中 (無料)	<ul style="list-style-type: none"> <li>2009年11月、xPSSS は従来のXML-DB を利用する方法 (xPSSS) から、RDB (PostgreSQL) を利用する方式に変更され、PDBj Mine に統合された。</li> </ul>
2	PDB Archive	ftp://snaphots.rcsb.org, ftp://snaphots.rcsb.org/rsyncSnaphots.sh	公開中 (無料)	<ul style="list-style-type: none"> <li>FTP と rsync によるサービス</li> </ul>
3	PDBj	http://pdbj.org	公開中 (無料)	<ul style="list-style-type: none"> <li>利用者の使用頻度が高い項目を中心にカスタマイズする機能や、これまで REST サービスでのみ利用ができた検索結果のダウンロード機能を追加し、HTML5 技術を利用したダイナミックなウェブサイトの 6 版を開発、2013年5月に公開した。</li> <li>JST バイオサイエンスデータベースセンター (NBDC) の統合的データベース運営として、NBDC のデータセンターに PDBj のポータルを設置し、阪大蛋白研のポータルと同期した運用を2012年12月から開始した。</li> <li>2014年、従来の PDB から新フォーマット PDBx への移行を予定。</li> </ul>
4	PDBj 登録サーバ	—	公開中 (無料)	<ul style="list-style-type: none"> <li>RCSB、PDBe と国際連携し、登録業務の標準化・自動化システムを開発中である。2014年に公開を予定している。</li> </ul>
5	PDBj-BMRB ウェブサイト	http://bmrdep.pdbj.org	公開中 (無料)	<ul style="list-style-type: none"> <li>PDBj-BMRB を効率的に利用するための手引き、実験データの解析あるいは登録を支援するツールの紹介を行うポータルサイト (BMRB portal) を2013年1月公開した。</li> </ul>
6	SeSAW (シーソー)	http://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/SeSAW/	公開中 (無料)	<ul style="list-style-type: none"> <li>配列と構造の同時アラインメントを行う MAFFTash、配列と構造の双方の情報から機能推定を行う SeSAW、それらのパイプライン化による SFAS と、複合体構造モデルを得る surFit パイプラインを構築・公開し、実験科学者との共同研究に応用した。</li> </ul>
7	GIRAF (ジラフ)	http://ipr.pdbj.org/giraf/	公開中 (無料)	<ul style="list-style-type: none"> <li>より効率的な構造データベース検索と柔軟な原子アラインメントが行えるよう改良した。</li> </ul>

	ツール名	URL	公開状況	備考
8	MAFFTash (マフタッシュ)	<a href="http://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/MAFFTash/">http://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/MAFFTash/</a>	公開中 (無料)	・配列と構造の同時アラインメントを行う MAFFTash、配列と構造の双方の情報から機能推定を行う SeSAW、それらのパイプライン化による SFAS と、複合体構造モデルを得る surFit パイプラインを構築・公開し、実験科学者との共同研究に応用した。
9	eF-site (エフサイト)	<a href="http://ef-site.hgc.jp/ef-site/index.jsp">http://ef-site.hgc.jp/ef-site/index.jsp</a>	公開中 (無料)	—
10	eF-surf (エフサーフ)	<a href="http://ef-site.hgc.jp/ef-surf/top.do">http://ef-site.hgc.jp/ef-surf/top.do</a>	公開中 (無料)	—
11	eF-seek (エフシーク)	<a href="http://ef-site.hgc.jp/ef-seek/top.do">http://ef-site.hgc.jp/ef-seek/top.do</a>	公開中 (無料)	—
12	jV (PDBj Viewer) 公開サイト	<a href="http://pdbj.org/jv/index_j.html">http://pdbj.org/jv/index_j.html</a>	公開中 (無料)	・従来の jV を改良し、色分け立体視表示機能の追加実装を行い、2 分割立体視に不慣れなユーザも色めがねを使って容易に立体視ができるようにした。
13	ProMode (ProMode-Elastic)	ProMode-Elastic : <a href="http://pdbj.org/#!/promode-elastic">http://pdbj.org/#!/promode-elastic</a>	公開中 (無料)	・ProMode (ProMode-Elastic を公開したため、公開終了) ・ProMode-Oligomer (Promode-Elastic を公開したため、公開終了)
14	SEALA (SEquence ALignment Analyzer、セアラ)		公開中 (無料)	—
15	ASH (Alignment of Structural Homologues)	RASH ( Rapid ASH ) : <a href="http://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/rash/">http://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/rash/</a> 、 GASH ( Genetic- algorithm ASH ) : <a href="http://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/gash/">http://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/gash/</a>	公開中 (無料)	—
16	eProtS (Encyclopedia of Protein Structures、イー プロッツ、蛋白質 構造百科事典)	<a href="http://pdbj.org/eprot/index_ja.cgi">http://pdbj.org/eprot/index_ja.cgi</a>	公開中 (無料)	—

	ツール名	URL	公開状況	備考
17	MoM (Molecule of the Month):	<a href="http://pdj.org/#!mom?tab=date">http://pdj.org/#!mom?tab=date</a>	公開中 (無料)	・2013年11月現在、167項目を公開。
18	Protein Globe	<a href="http://pdj.org/globe/">http://pdj.org/globe/</a>	公開中 (無料)	—
19	Sequence Navigator	<a href="http://pdj.org/#!seqNavi?tab=id">http://pdj.org/#!seqNavi?tab=id</a>	公開中 (無料)	—
20	EM Navigator	<a href="http://pdj.org/emnavi/?lang=ja">http://pdj.org/emnavi/?lang=ja</a>	公開中 (無料)	<ul style="list-style-type: none"> <li>・全動画を再作成し、HTML5の動画配信方式に切り替え携帯電話端末などでの閲覧を可能にした。</li> <li>・EMDBスキーマ、バージョン1.9への更新に対応し、データ管理システムの改変を行った。より一般向けの構造閲覧サービス「万見」の一般向け版「万見プライム」を作成し、公開した。</li> </ul>
21	CRNPRED (クルンプレッド)	<a href="http://ipr.pdbj.org/crnpred/">http://ipr.pdbj.org/crnpred/</a>	公開中 (無料)	—
22	Spanner (スパンナー)	<a href="http://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/spanner/">http://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/spanner/</a>	公開中 (無料)	—
23	SFAS (Sequence to Function Annotation Server)	<a href="http://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/sfas/">http://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/sfas/</a>	公開中 (無料)	<ul style="list-style-type: none"> <li>・SFASを高度化し、アミノ酸配列から推定される天然変性ドメインをIDD_Navigatorによってまず同定し、種々のthreading/アラインメント手法(HHPred, FFAS, FORTE, PSIBLAST, and BLAST)を組み合わせて構造モデルを作成し、パイプラインによる機能推定が行える仕組みを完成し公開した</li> </ul>

### 2.1.2. 第三者によるデータベース・ソフトウェア等の活用事例

PDBj データベースは、ゲノム情報と同様に、生命科学のうち生体分子を扱う分野（分子生物学、生化学、薬学、生理学、生物物理学等）における基本的な情報を提供しており、これらの分野の国内のほとんどの研究では、PDBj による蛋白質の構造情報が直接あるいは間接的に利用されている。

- 1) 平成 24 年度に発表された論文や学会発表のうちで、代表的な活用例 6 件を挙げる。

<p><b>例 1) X 線結晶解析研究での応用① (構造生命科学)</b></p>
<p>大阪大学蛋白質研究所の高木淳一教授のグループでは、神経シナプスにおいて 2 つのニューロンをつなぐ役割をもつニューレキシンとニューロリジンという 2 つの分子が結合した様子を、X 線結晶解析と光学顕微鏡および電子顕微鏡という 3 種類のマルチスケールな手法で解析し、シナプスに新しい平板状構造体が存在することを見いだした (Tanaka et al. (2012) Cell Report 2, 101-110)。この X 線結晶解析における位相決定のために分子置換法が使われ、類似構造を持つと推定される蛋白質立体構造が PDBj データベースから探索され (PDBID: 3B3Q) 利用されている。</p>
<p><b>例 2) X 線結晶解析研究での応用② (薬学)</b></p>
<p>東京大学大学院薬学研究科の長野哲雄教授のグループでは、種々の癌に関連するセリン/スレオニン・キナーゼ PIM1 に対して、極めて高い結合活性を有する新たな阻害剤を開発している (Nakano et al. (2012) J. Med. Chem. 55, 5151-5164)。この阻害剤開発において PIM1 キナーゼと阻害剤との複合体の X 線結晶構造が解析されており、その位相決定のために分子置換法が使われ、類似構造を持つと推定される蛋白質立体構造が PDBj データベースから探索され (PDBID: 3A99) 利用されている。</p>
<p><b>例 3) 核磁気共鳴 (NMR) 法研究での応用 (薬学、構造生命科学)</b></p>
<p>東京大学大学院薬学研究科の嶋田一夫教授のグループは、G 蛋白質共役受容体 (GPCR) の信号伝達メカニズムを核磁気共鳴 (NMR) 法によって解析し、GPCR のダイナミックな構造変換が、アゴニストやアンタゴスト等のリガンドの違いによってダイナミックに引き起こされることを突き止めている (Kofuku et al. (2012) Nature Comm. 3: 1045)。彼らの研究においては、NMR スペクトル変化と立体構造変化との関係付けを行うにあたり、PDBj データベースに登録されている <math>\beta 2</math> アドレナリン受容体の inverse agonist との複合体 (PDBID: 2RH1) および full agonist と G 蛋白質との複合体 (PDBID: 3SN6) との詳細な比較検討がなされた。</p>
<p><b>例 4) バイオインフォマティクス研究での応用 (情報科学)</b></p>
<p>産総研・生命情報工学研究センター (CBRC) の藤博幸副所長のグループは、ゲノムおよび蛋白質アミノ酸配列の情報から、機能部位をバイオインフォマティクスを用いて高い精度で推定する新規手法を開発している (Nemoto &amp; Toh (2012) BMC Struct. Biol. 12: 11)。この研究において統計的な解析を行うため、PDBj データベースに登録されている蛋白質の中から、54 の蛋白質構造を抽出して利用している。</p>
<p><b>例 5) スーパーコンピュータ「京」での創薬応用への応用 (計算科学)</b></p>
<p>東京大学先端科学技術研究センターの藤谷秀章特任教授および京都大学大学院薬学研究科の奥野恭史教授の 2 つの研究グループでは、スーパーコンピュータ「京」を用いた創薬研究をそれぞれ独立に行っており (前者は文部科学省 HPCI 戦略プログラム・戦略分野 1 として、後者は一般財団法人・高度情報科学技術研究機構が公募した産業利用課題として)、創薬候補化合物が蛋白質受容体に結合する際の結合自由エネルギーを、リアルなモデル系と新規アルゴリズムによるプログラムを用いた分子シミュレーションによって高い精度で算出し、新規薬物の探索を行っている。前者はアカデミアが中心であり、後者は多くの企業研究者との共同研究である。その際、2 つのグループが行っている分子シミュレーションのターゲットとなる蛋白質は、PDBj データベースに登録された構造情報を利用している。</p>

#### 例6) 企業における薬物スクリーニング研究への応用 (産業利用)

塩野義製薬の酒匂佑介らは「IT 創薬技術を用いた Endomorphin-1 の非ペプチド化研究」として下記の創薬研究を行い、平成 24 年 11 月 29-30 日の第 40 回構造活性相関シンポジウムで発表している。生理活性ペプチドから非ペプチド性の低分子リガンドを探索・設計する技術開発の一環として、Endomorphin-1 (EM-1) をテーマにした創薬実証研究を行った。EM-1 は、内在性の  $\mu$  オピオイドの一種であり、このペプチドを同等のプロファイルを有する非ペプチド化合物に変換することができれば、新規な疼痛抑制薬として高い価値を持つものと期待される。EM-1 -  $\mu$  受容体複合体モデルを構築する際、研究の初期には  $\mu$  受容体の立体構造が未知であったため、PDBj データベースに登録されていた GPCR の一種であるヒト  $\beta 2$  アドレナリン受容体の結晶構造 (PDBID: 2RH1) を鋳型構造として、アミノ酸アライメントを基にホモロジーモデルを構築した。このモデル構造を基に、in-silico スクリーニングを行い 348 化合物を購入し、 $\mu$  受容体に対する結合親和性試験を実施した。その結果、化合物濃度 10 $\mu$ M における %inhibition  $\geq 50$  をヒット化合物として、21 個のヒット化合物を見出した。さらに、これらヒット化合物の最適化を行うため、2012 年に PDBj に登録・公開された  $\mu$  受容体とアンタゴニストとの複合体構造 (PDBID: 4DKL) を基に構造活性相関研究を実施し、 $K_i=7$  nM の強い活性をもつ新規化合物を見出した。

- 2) PDBj データベースを直接的に研究へ利用した研究例を、平成 24 年度の日本分子生物学会年会と日本生物物理学会年会から抽出したものを以下に示す。前者では 7 件、後者では 15 件あった。また、間接的な利用の場合、DB 名を記載しないこともあるため、実際の利用件数はさらに多いと考えられる。

第 35 回日本分子生物学会年会 (2012 年 12 月)

#### <ワークショップ>

1. 【1W7II-2】 RNA 合成の構造基盤  
アーキア (古細菌) RNA ポリメラーゼの構造と機能の多様性。平田 章 (愛媛大・院理工・物質生命)
2. 【2W3III-3】 ウイルス進化の統合生物学的研究  
計算科学的手法を用いたインフルエンザウイルス蛋白質の解析。五十嵐 学 (北大・人獣共通感染症リサーチセンター)
3. 【3W2II -2】 次世代のバイオインフォマティクス  
Development and Evaluation of a Novel Identification Algorithm of Transcription Factor Binding Motifs in Genome DNA Sequences. 舘野 賢 (兵庫県大・院 生命理学)
4. 【3W2II -4】 次世代のバイオインフォマティクス  
タンパク質構造比較アルゴリズム。渋谷 哲朗 (東大・医科研・ヒトゲノムセンター)

#### <ポスター>

5. Structure analysis of the flagellar hook-basal body with C ring by electron cryomicroscopy (最近べん毛モーター・スイッチ複合体の極低温電子顕微鏡による構造解析)。宮田知子、難波啓一 (大阪大学大学院生命機能研究科)

- |   |
|---|
| 6. ReSpec; MS/MS database for phytochemicals. (ReSpec ; 植物代謝産物の構造推定データベースの構築) 澤田 有司 (理研 植物科学研究センター)   |
| 7. Prediction of Interface Residues for Small-molecule Ligands Using Interface Residue Propensities. (結合部位におけるアミノ酸残基使用傾向を用いた低分子リガンド結合残基の予測) 富田竜平(長浜バイオ大学) |

第 50 回生物物理学会年会 (2012 年 9 月)

- |   |
|---|
| 1. Structural fluctuations of capping proteins analyzed by molecular dynamics simulations (分子動力学法による capping protein (CP) の動的構造の解析) . Ryotaro Koike 1, Shuichi Takeda 2, Yuichiro Maeda 2, Motonori Ota1 (1 Grad. Sch. Info. Sci., Nagoya Univ., 2 Struct. Biol. Res. Center, Grad. Sch. of Sci., Nagoya Univ.) 口頭発表 蛋白質-構造機能相関 : NMR, 計算機科学等 Protein: Structure & Function: NMR & calculation、演題番号 1B1546                                |
| 2. A Molecular Dynamics Study on Proton Pump Function of Cytochrome c Oxidase (シトクローム c 酸化酵素のプロトンポンプ機構に関する分子動力学シミュレーションによる研究) . Takefumi Yamashita 1 (1 Research Center for Advanced Science and Technology, University of Tokyo)、口頭発表 蛋白質-構造機能相関 : NMR, 計算機科学等 Protein: Structure & Function: NMR & calculation、演題番号 1B1558  |
| 3. Free energy profile for binding of ADP to Hsp90 with molecular dynamics simulation (分子動力学シミュレーションによる Hsp90 と ADP の結合自由エネルギープロファイル) . Kazutomo Kawaguchi 1, Hiroyuki Takagi 1, Masashi Iwayama 1, Megumi Nishimura 1, Hiroaki Saito 1, Hidemi Nagao 1 (1 Inst. Sci. Eng., Kanazawa Univ.)、口頭発表 蛋白質-物性 I Protein: Property (I)、演題番号 1E1400   |
| 4. Database analysis of the degree of protein conformational changes in RNA-protein interactions (RNA とタンパク質の相互作用におけるタンパク質構造変化のデータベース解析) . Chihiro Kubota 1, Kei Yura 1,2,3 (1 Graduate School of Humanities and Sciences, Ochanomizu University, 2 Center for Informational Biology, Ochanomizu University, 3 Center of Simulation Sciences, Ochanomizu University)、口頭発表 生命情報科学, バイオエンジニアリング Bioinformatics & Bioengineering、演題番号 1I1412 |
| 5. Development of a force field of backbone dihedral angles for each amino acid using Protein Data Bank (PDB データベースによるアミノ酸ごとに最適化した主鎖二面角力場) . Yoshitake Sakae 1,2, Yuko Okamoto 1,3,4 (1 Dept. of Phys., Nagoya Univ., 2 IMS, 3 Structural Biology Research Center, Nagoya Univ., 4 Center for Computational Science, Nagoya Univ.)、ポスター 蛋白質構造 Protein: Structure、演題番号 1PT132  |
| 6. Molecular dynamics model of cofilactin filament (コフィルアクチンフィラメントの分子動力学モデルの構築) . Tetsuya Fujii 1, Yasuhiro Inoue 2, Taiji Adachi 3 (1 Grad. Sch. Eng., Dept. of Micro Eng., Kyoto Univ., 2 Dept. of Biomechanics, Inst. Frontier Med. Sci., Kyoto Univ., 3 Dept. of Biomechanics, Inst. Frontier Med. Sci., Kyoto Univ.)、ポスター 蛋白質構造 Protein: Structure、演題番号 1PT133   |
| 7. A Soft and Transparent Handleable Protein Model (透明で柔軟性を持った実用性の高いタンパク質分子模型) . Masaru Kawakami 1 (1 Sch. Mat. Sci.)、ポスター 蛋白質構造 Protein: Structure。演題番号 1PT136   |

8.	I-StDom: A dataset of Independently foldable Structural Domains automatically delineated from protein structures (独立してフォールドする構造ドメインデータベースの構築) . Yuki Umezawa 1,2, Teppei Ebina 2, Yutaka Kuroda 1 (1 Dept of Biotech. & Life Sci., Tokyo University of Agriculture & Technology, 2Brain Science Inst., RIKEN)、ポスター バイオインフォマティクス Bioinformatics、演題番号 2PT001
9.	Common structural / sequence features of proteins that share non-sequential structural similarity. Kengo Sawada 1, Shintaro Minami 1, Geroge Chijenji 1 (1 Dept. of eng. , Nagoya Univ.)、ポスター バイオインフォマティクス Bioinformatics、演題番号 2PT004
10.	PoSSuM: a database for searching similar pairs of known and potential ligand-binding sites in proteins (PoSSuM: タンパク質の既知及び潜在的基質結合部位類似性検索のためのデータベース) . Jun-ichi Ito 1,2,4, Yasuo Tabei 3, Kana Shimizu 1, Koji Tsuda 1,3,Kentaro Tomii 1,2 (1 CBRC, AIST, 2 Department of Computational Biology, Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo, 3 Minato Discrete Structure Manipulation System Project, JST,4 National Institute of Biomedical Innovation)、ポスター バイオインフォマティクス Bioinformatics、演題番号 2PT005
11.	Development of method for predicting carbohydrate binding site using support vector machine (サポートベクターマシンを用いた糖鎖結合部位予測手法の開発) . Masaki Banno 1, Kentaro Shimizu 1 (1 Grad Sch Agricul. life sci., Univ Tokyo)、ポスター バイオインフォマティクス Bioinformatics、演題番号 2PT006
12.	Some characteristic features of non-sequential structural alignment: difference between sequential and non-sequential alignments (配列順序を無視したタンパク質構造アライメントの性質) . Tatsuo Mukai 1, Kengo Sawada 1, Shintaro Minami 1, George Chikenji1 (1 Grad. Sch. of Eng. Univ. of Nagoya)、ポスター バイオインフォマティクス Bioinformatics、演題番号 2PT009
13.	Analysis of Domain and Non-Domain Interactions in Protein-Protein Interaction Network (蛋白質・蛋白質相互作用ネットワークにおけるドメイン及び非ドメイン間相互作用の解析) . Komori Satoshi 1, Sarai Akinori 1, Fujii Satoshi 1 (1 Kyusyu Institute of Technology)、ポスター バイオインフォマティクス Bioinformatics、演題番号 2PT102
14.	Integration of Structural and Biochemical Information into Protein Interaction Network (分子ネットワークにおける構造情報と相互作用情報の統合) . Yuji Kawakami 1, Akinori Sarai 1, Satoshi Fujii 1 (1 Kyushu Institute of Technology)、ポスター バイオインフォマティクス Bioinformatics、演題番号 2PT106、p.s122
15.	A study of molecular dynamics simulation on Photosystem II protein (光合成膜蛋白質 PSII の分子動力学シミュレーション) . Koji Ogata 1, Makoto Hatakeyama 2, Taichi Yuki 2, Waka Uchida 2, Shinichiro Nakamura 1 (1 RIKEN Research Cluster for Innovation, 2Tokyo Institute of Technology)、ポスター 光合成 Photobiology: Photosynthesis、演題番号 3PT232

### 2.1.3. データベース・ソフトウェア等へのアクセス数/ダウンロード数、visit 数

	ツール名	アクセス数、ダウンロード数、visit 数	集計期間	備考
(1)	PDBj 検索結果ページ (xPSSS/ PDBj-Mine)	検索回数：14,030,736	2012 年度	
(2)	PDB Archive (FTP と rsync によるサービス)	ダウンロード数：22,788,917	2012 年度	
(3)	PDBj トップページ	アクセス数 英語版：138,816 日本語版：94,880 簡体中国語版：3,252 繁体中国語版：2,721 韓国語版：2,651	2012 年度	
(4)	PDBj 登録サーバ	アクセス数：258,236	2012 年度	
(5)	PDBj-BMRB ウェブサイト	アクセス数：5,961,707	2012 年度	
(6)	SeSAW (シーソー)	アクセス数：2,683	2012 年度	
(7)	GIRAF (ジラフ)	アクセス数：5,072	2012 年度	
(8)	MAFFTAsh (マフタッシュ)	アクセス数：2,770	2012 年度	
(9)	eF-site (エフサイト)	アクセス数：88,826	2012 年度	
(10)	eF-surf (エフサーフ)	アクセス数：447	2012 年度	
(11)	eF-seek (エフシーク)	アクセス数：128	2012 年度	
(12)	jV (PDBj Viewer) 公開サイト	アクセス数：9,466	2012 年度	
(13)	ProMode (プロモード)	アクセス数：107,819	2012 年度	
(14)	SEALA (SEquence ALignment Analyzer、セアラ)	アクセス数：7,052	2012 年度	
(15)	ASH (Alignment of Structural Homologues)	アクセス数：1,957	2012 年度	
(16)	eProtS (Encyclopedia of Protein Structures、イープロッツ、蛋白質構造百科事典)	アクセス数：394,236	2012 年度	
(17)	MoM (Molecule of the Month)	アクセス数：438,179	2012 年度	
(18)	Protein Globe	アクセス数：5,048	2012 年度	
(19)	Sequence Navigator	アクセス数：19,192	2012 年度	
(20)	EM Navigator	アクセス数：5,848,932	2012 年度	
(21)	CRNPRED (クルンプレド)	アクセス数：7,284	2012 年度	
(22)	Spanner (スパナー)	アクセス数：3,883	2012 年度	
(23)	SFAS (Sequence to Function Annotation Server)	アクセス数：4,695	2012 年度	

本研究開発の成果プログラム、およびデータベースのアクセス数、ダウンロード数、検索回数を示した。PDBj のトップページの利用状況を本研究開発終了前と比べると、2010 年 4 月～10 月のアクセス数は英語版では 71,349 回であり、日本語版では 66,643 回である。2012 年度では英語版、日本語版ともかなりの増加が見られる。個々のサイトについては、アクセス数等の変化は様々であるが、eF-site (エフサイト)、MoM (Molecule of the Month)、

ProMode (プロモード)、SFAS (Sequence to Function Annotation Server) など、アクセス数が大幅に増加しており、本データベースが本研究開発終了後も着実に発展していることを示している。

## 2.2. 課題終了後の研究開発成果の継続状況や発展状況

### 2.2.1. BIRD 終了から現在まで、BIRD で取り組んだ課題に関連した研究開発成果の継続状況や発展状況 (国内外の研究者との共同研究へ発展した等)

本研究開発終了後、2011年4月にJSTバイオサイエンスデータベースセンター(NBDC)によって「蛋白質構造データバンクの国際的な構築と統合化」事業が採択され、日本蛋白質構造データバンク(PDBj)の事業を継続的に実施中(2014年3月まで)である。NBDCのプログラムでは、特にデータベースの統合化に力点が置かれたこともあり、PDBとNMR実験情報のデータバンク(BMRB)のデータベースの構築・公開に加えて、セマンティック・ウェブ技術を用い、他の生命データベースとの統合化による高次生命機能の理解に資する研究開発を行うことをミッションとした。特に、セマンティック・ウェブでの標準フォーマットであるRDF(Resource Description Framework)を用いてPDBとBMRBデータを記述したPDB/RDFとBMRB/RDFを代表研究者のグループが開発し、さらにEBIやWisconsin大学の研究者と協力して高度化した結果、現在ではそれらが世界標準として採用されて配布されている。

### 2.2.2. BIRD 終了後に発表された論文リスト

M. Lim, T. Kim, J. J. Sarmiento, D. Kuroda, H. V. Dinh, A. R. Kinjo, K. Amada, S. Devadas, H. Nakamura, D. M. Standley (2011) Bridging the gap between single-template and fragment based protein structure modeling using Spanner. *Immunome Res.* 7(1), 1-8 (1 Apr. 2011)

Ashwini Patil, Kenta Nakai, Haruki Nakamura (2011) HitPredict: a database of quality assessed protein-protein interactions in 9 species. *Nucleic Acids Research*, 39, Database issue, D744-D749.

E. Kanamori, S. Igarashi, M. Osawa, Y. Fukunishi, I. Shimada, H. Nakamura, (2011) Structure determination of a protein assembly by amino acid selective cross-saturation. *PROTEINS*, 79 (1), 179-190.

Daisuke Kuroda, Hiroki Shirai, Matthew P. Jacobson, Haruki Nakamura (2012) Computer-aided antibody design. *PEDS* 25(10), 507-521.

# Akira Kinjo, Haruki Nakamura (2012) GIRAF: a method for fast search and flexible alignment of ligand binding interfaces in proteins at atomic resolution. (2012) Biophysics 8, 79-94.

# Akira R. Kinjo, Haruki Nakamura (2012) Composite Structural Motifs of Binding Sites for Delineating Biological Functions of Proteins. PloSONE 7 (2), e31437.

# Akira R. Kinjo, Hirofumi Suzuki, Reiko Yamashita, Yasuyo Ikegawa, Takahiro Kudou, Reiko Igarashi, Yumiko Kengaku, Hasumi Cho, Daron M. Standley, Atsushi Nakagawa, Haruki Nakamura (2012) Protein Data Bank Japan (PDBj): maintaining a structural data archive and resource description framework format. Nucleic Acids Research, 40, Database issue, D453-D460.

# Berman, H.M., Kleywegt, G.J., Nakamura, H., Markley, J.L. (2012) The protein data bank at 40: Reflecting on the past to prepare for the future, Structure 20(3), 391-396

Tsuchiya, Y., Nakamura, H., Kinoshita, K. (2012) Discrimination between biological interfaces and crystal-packing contacts, Advances and Applications in Bioinformatics and Chemistry 5(1), 99-113

# Berman, H.M., Kleywegt, G.J., Nakamura, H., Markley, J.L. (2013) Mini review: The future of the protein data bank, Biopolymers 99(3), 218-222

Sato, J., Kozaki, K., Handa, S., Ikeda, T., Saka, R., Tomizuka, K., Nishiyama, Y., Okumura, T., Hirai, S., Ohno, T., Ohta, M., Date, S., Nakamura, H. (2013) Protein experimental information management system (PREIMS) based on ontology: Development and applications, IPSJ Transactions on Bioinformatics 6, 9-17

# Berman, H.M., Kleywegt, G.J., Nakamura, H., Markley, J.L. (2013) How community has shaped the protein data bank, Structure 21(9), 1485-1491

# : 今回の追跡調査において研究代表者が主要な論文として指定したもの

### 2.2.3. 研究開発成果の現在の国際的な評価・位置づけ

PDBj では世界の約 1/4 の登録データの編集処理作業を実施し、生体高分子構造データベースの構築・維持・管理を行う国際組織の一翼を担う主要な組織になっている。また、wwPDB（国際蛋白質構造データバンク）の他のメンバーである米国、欧州のグループが対応しなかった RDF 化にいち早く着手し、上述したとおり PDB/RDF および BMRB/RDF が世界標準のフォーマットとして採用され配布されている。以上のように、研究開発の成果は、国際的に高く評価されている。

### 2.3. 現在の科学技術研究における研究開発成果の活用状況、発展状況のまとめ

PDBj は 2001 年以降、本研究開発を通して、蛋白質立体構造データベースの高度化を進めてきた。X 線立体構造に加え、NMR による立体構造データベース (BMRB)、3 次元電子顕微鏡構造閲覧サイト (EM Navigator) を加えることにより、PDBj は立体構造情報を中心とした蛋白質全体の情報への入り口としての重要な役割を果たすようになった。また、二次データベースや検索機能、予測機能の追加により、立体構造の情報ソースとしてだけでなく、検索、解析ツールとしての利用も広がっている。BIRD 終了後は NBDC のデータセンター PDBj のポータルを設置し、安定した情報提供を進めている。また、PDBj のダウンロード機能、個々の重要なデータベースの改良、あるいはビューアの改良など、データベース、ソフトウェアとしての高度化はもちろん利用者の使いやすさの視点からの改良も継続的に進められており、それらの利用者も増加している。

## 3. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果

### 3.1. バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

#### 3.1.1. バイオインフォマティクス分野の研究への貢献

基盤データである PDB の課題に対し PDBj で進められた様々な高度化の試みは、ほとんど全てのバイオインフォマティクス研究に基礎情報を与え続けている。

また、本課題で開発した PDBML、PDB/RDF 等のデータフォーマット、またそのフォーマットに則ったデータは、セマンティック・ウェブ形式でデータ統合を進めるバイオインフォマティクスの基盤となっている。

さらに、開発した構造データの解析ツール (配列と構造のマルチプル・アラインメント・ツール、類似配列の探索ツール、類似フォールドの探索ツール、類似部分構造 (リガンド結合部位) の探索ツール、類似分子表面構造の探索ツールなど) を開発し公開することにより、配列→構造→機能のアノテーションの仕組みを、バイオインフォマティクスの提供した。

開発全体にわたり、幅広い利用者の立場に立ち、見やすさや、分かりやすさにこだわった閲覧サイトの構築は新しいソフトウェアやデータベースの開発者に影響を与えていると思われる。

### 3.1.2. ライフサイエンス分野（バイオインフォマティクス以外）やその他、科学技術分野の研究への貢献

PDBj は基盤的データベースとして、ライフサイエンス全般にわたり、特に分子レベルの研究者に対し、研究対象の遺伝子に関連する蛋白質に関する構造情報を提供し、分子生物学、生理学、遺伝子工学、合成生物学の発展に欠かせない基礎情報を与え続けている。（高い品質を保証しているデータベースであることが特に重要である。）

開発した構造データの解析ツール（配列と構造のマルチプル・アラインメント・ツール、類似配列の探索ツール、類似フォールドの探索ツール、類似部分構造（リガンド結合部位）の探索ツール、類似分子表面構造の探索ツールなど）により、配列→構造→機能のアノテーション情報を提供した。これらは、アカデミック研究者のみならず企業研究者に対してもツールを提供し、応用研究を促進すると同時に、より良い新たな解析ツールの開発へ向けての指針になると思われる。

蛋白質の構造や機能を平易に解説した「eProtS: タンパク質構造百科事典」の構築、および「今月の分子」の日本語版の公開により、蛋白質の生命活動に果たす役割を一般に紹介し、教育と普及に貢献した。

### 3.2. 人材育成の面から参加研究者の活動状況

#### 3.2.1. 研究開発に参加した研究者のキャリアアップ

本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は8名いた。

### 3.3. 社会的及び経済的な効果

#### 3.3.1. 研究開発成果が大学や公的研究機関、企業等で、応用に向けて継承または発展した例

2.1.2 の項の「第三者によるデータベース・ソフトウェア等の活用事例」で示したように、PDBj の蛋白質の構造情報は様々な分野で利用されている。一例をあげれば、東京大学大学院薬学研究科の嶋田一夫教授のグループが核磁気共鳴（NMR）法によって G 蛋白質共役受容体（GPCR）の解析を行った研究がある。GPCR は膜蛋白質の一種で、既存の医薬のターゲット蛋白質の中で最も多く標的とされている分子であるとともに、今後も引き続き創薬ターゲットとして注目されている。創薬分野では特に重要な蛋白質であるにも関わらず、詳細な立体構造の分析は難しく、長年その解明が待たれていたが、最近になって続々と GPCR-リガンド複合体の3次元構造が X 線解析などの手法によって明らかになってきた。嶋田教授らは GPCR の NMR 測定データと、PDBj に蓄積された他の蛋白質の構造データ

を比較することで、それまで困難なターゲットであったこの膜蛋白質の動的な挙動を解明している。

このような知見により、これまで経験のみで行っていた GPCR のリガンド設計にコンピュータを用いたラショナルなアプローチをとることができるようになったことは、製薬企業にも大きなインパクトを与えた。塩野義製薬の酒匂佑介氏らによる「IT 創薬技術を用いた Endomorphin-1 の非ペプチド化研究」はその代表的な例である。このように PDBj データベースは、ゲノム情報と並び、生体分子を扱う各分野（分子生物学、生化学、薬学、生理学、生物物理学等）の基本的な情報基盤として存在しており、科学的発見や応用開発に必要な情報を提供し続けていると言える。

### **3.3.2. その他、研究開発成果が社会的、経済的な効果・効用につながる兆し、可能性**

PDBj によって提供される蛋白質の立体構造は、先に述べられた「第三者による利用」にもあるように様々な分野で利用されている。先に述べられた例の多くは大学等の研究者によるものであるが、企業ではその成果を公表することは非常に少ないが、PDBj によって提供される蛋白質の立体構造を日常的に利用しており、すでにライフサイエンス関連産業にとって重要な経済的役割を果たしている。今後も、技術の向上とともにその利用は益々広がると予想される。

# 資料編

## 1. 論文リスト

1. Gou, P., Hanke, G. T., Kimata-Arigo, Y., Standley, D. M., Kubo, A., Taniguchi, I., Nakamura, H. and Hase, T. "Higher Order Structure Contributes to Specific Differences in Redox Potential and Electron Transfer Efficiency of Root and Leaf Ferredoxins" *Biochemistry*, 45, 14389- 14396 (2006) (査読あり)
2. # Berman, H. M., Burley, S. K., Chiu, W., Sail, A., Adzhubei, A., Bourne, P. E., Bryant, S. H., Dunbrack, Jr., R. L., Fidelis, K., Frabk, J., Godzik, A., Henrick, K., Joachimiak, A., Heymann, B., Jones, D., Markley, H. L., Moulton, J., Montelione, G. T., Orengo, C., Rossmann, M. G., Rost, B., Saibil, H., Schwede, T., Standley, D. M., and Westbrook, J. D. "Outcome of a Workshop on Archiving Structural Models of Biological Macromolecules" *Structure*, 14, 1211- 1217 (2006) (査読あり)
3. Standley, D. M., Yonezawa, Y., Goto, Y., Nakamura, H. "Flexible docking of an amyloid-forming peptide from  $\beta$  2-microglobulin" *FEBS Letters*, 580, 6199- 6205 (2006) (査読あり)
4. #\* Berman, H.M. , Henrick, K, Nakamura, H and Markley, J. L. "The worldwide Protein Data Bank (wwPDB): ensuring a single, uniform archive of PDB data" *Nucleic Acids Research*, 35 Database issue D301-D303 (2006) (査読あり)
5. Tsuchiya, Y., Kinoshita, K., and Nakamura, H. "Analysis of homo-oligomer interfaces of proteins from the complementarity of molecular surface, electrostatic potential and hydrophobicity." *Protein Eng Des Sel.*, 19, 421-429 (2006) (査読あり)
6. Tsuchiya, Y., Kinoshita, K., Ito, N., and Nakamura, N. "PreBI: Prediction of biological interfaces of proteins in crystals." *Nucl Acid Res*, 34, W320-324 (2006) (査読あり)
7. # 木下賢吾 " eF-site を利用した機能部位の予測", *バイオテクノロジージャーナル*, 6, 444-447 (2006) (査読あり)
8. Katoh, K., Toh, H. "PartTree: an algorithm to build an approximate tree from a large number of unaligned sequences." *Bioinformatics*, 23(3), 372-374 (2007) (査読あり)
9. Akutsu, H. and Takayama, Y. "Functional roles of the heme architecture and its environment in tetraheme cytochrome c." *Acc. Chem. Res.* 40(3), 171-178 (2007) (査読あり)
10. Shen, Y., Takayama, Y., Wei, Y., Harada, E., Eiichi, N., and Akutsu, H. "Refolding of mis-folded recombinant cytochrome c3 with strong cation exchange

- chromatography.” *J. Liq. Chromatogr., Relat. Technol.*, 30, 1051-1059 (2007) (査読あり)
11. Takayama, Y., Shen, Y., and Akutsu, H. “Process of maturation of tetraheme cytochrome c3 in a *Shewanella* expression system.” *J. Biochem.* 141(1), 121-126 (2007) (査読あり)
  12. Patil, A., Nakamura, H., “The role of charged surface residues in the binding ability of small hubs in protein-protein interaction networks.” *BIOPHYSICS*, 3, 27-35 (2007) (査読あり)
  13. # Standley, D.M., Toh, H., Nakamura, H., “ASH structure alignment package: Sensitivity and selectivity in domain classification.” *BMC Bioinformatics*, 8, id.116 (2007) (査読あり)
  14. # Berman, H.M., Henrick, K., Nakamura, H., Markley, J. L., “Reply to: Building meaningful models of glycoproteins.” *Nature Structure Molecular Biology*, 14, 354-355 (2007)
  15. # Berman, H.M., Henrick, K., Nakamura, H., Markley, J.L., Bourne, P.E., Westbrook, J., “Realism about PDB.” *Nature Biotechnology*, 25, 845-846 (2007) (査読あり)
  16. # Kinoshita, K., Murakami, Y., Nakamura, H., “eF-seek: prediction of the functional sites of proteins by searching for similar electrostatic potential and molecular surface shape.” *Nucleic Acids Res*, 35, W398-402 (2007) (査読あり)
  17. Hosaka, Y., Iwata, M., Kamiya, N., Yamada, M., Kinoshita, K., Fukunishi, Y., Tsujimae, K., Hibino, H., Aizawa, Y., Inanobe, A., Nakamura, H., Kurachi, Y., “Mutational analysis of block and facilitation of HERG current by a class III anti-arrhythmic agent, nifekalant.” *Channels*, 1, 198-208 (2007) (査読あり)
  18. Kanamori E., Murakami, Y., Tsuchiya, Y., Standley, D.M., Nakamura, H., Kinoshita, K., “Docking of protein molecular surfaces with evolutionary trace analysis.” *PROTEINS*, 69, 832-838 (2007) (査読あり)
  19. Kinjo, A.R., Nakamura, H., Similarity search for local protein structures at atomic resolution by exploiting a database management system. *BIOPHYSICS*, 3, 75-84 (2007) (査読あり)
  20. # 中村春木, 「蛋白質構造情報の高度化と統合データベース」 *蛋白質核酸酵素* 52, 1897-1905 (2007).
  21. Matsuki, Y., Akutsu, H., Fujiwara, T.,” Spectral Fitting for Signal Assignment and Structural Analysis of Uniformly <sup>13</sup>C-Labeled Solid Proteins by Simulated Annealing Based on Chemical Shifts and Spin Dynamics.” *J. Biomol. NMR*, 38, 325-339 (2007) (査読あり)

22. # Henrick, K., Feng, Z., Bluhm, W.F., Dimitropoulos, D., Doreleijers, J.F., Dutta, S., Flippen-Anderson, J.L., Ionides, J., Kamada, C., Krissinel, E., Lawson, C.L., Markley, J.L., Nakamura, H., Newman, R., Shimizu, Y., Swaminathan, J., Velankar, S., Ory, J., E. Ulrich, E.L., Vranken, W., Westbrook, J., Yamashita, R., Yang, H., Young, J., Yousufuddin, M., Berman, H.M., “Remediation of the protein data bank archive.” *Nucleic Acids Res.*, 36, D426-433 (2008) (査読あり)
23. Kinjo, A.R., Miyazawa, S., “On the optimal contact potential of proteins.” *Chemical Physics Letters*, 451, 132-135 (2008) (査読あり)
24. #\* Markley, J.L., Urich, E.L., Berman, H.M., Henrick, K., Nakamura, H., Akutsu, H., “BioMagResBank (BMRB) as a partner in the Worldwide Protein Data Bank (wwPDB): new policies affecting biomolecular NMR depositions.” *J. Biomol NMR*, 40, 153-155 (2008) (査読あり)
25. # Standley, D.M., Toh, H., Nakamura, H. “Functional annotation by sequence-weighted structure alignments: Statistical analysis and case studies from the Protein 3000 structural genomics project in Japan.” *PROTEINS*, 72 (4), 1333-1351 (2008) (査読あり)
26. # 中村春木, “蛋白質構造データバンク PDB と PDBj の誕生” *蛋白質核酸酵素*, 53, (2008).
27. # Katoh, K., Toh, H. “Recent developments in the MAFFT multiple sequence alignment program.” *Brief. Bioinform.* 9 (4), 286-298 (2008) (査読あり)
28. # Eldon L. Ulrich, Hideo Akutsu, Jurgen F. Doreleijers, Yoko Harano, Yannis E. Ioannidis, Jundong Lin, Miron Livny, Steve Mading, Dimitri Maziuk, Zachary Miller, Eiichi Nakatani, Christopher F. Schulte, David E. Tolmie, R. Kent Wenger, Hongyang Yao and John L. Markley, “BioMagResBank.” *Nucleic Acids Res*, 36, D402-408 (2008) (査読あり)
29. Katoh K, Toh H. “Improved accuracy of multiple ncRNA alignment by incorporating structural information into a MAFFT-based framework.” *BMC Bioinformatics*, 9:212 (2008) (査読あり)
30. Daiyasu, H., Saino, H., Tomoto, H., Mizutani, M., Sakata, K., Toh, H. “Computational and Experimental Analyses of Furcatin Hydrolase for Substrate Specificity Studies on Disaccharide-specific Glycosidases.” *J. Biochem.*, 144(4), 467-475 (2008) (査読あり)
31. Do CB, Katoh K. “Protein Multiple Sequence Alignment.” *Methods in Molecular Biology*, 484, 379-413 (2008) (査読あり)
32. Hamblin K, Standley DM, Rogers MB, Stechmann A, Roger AJ, Maytum R, van der Giezen M. “Localization and nucleotide specificity of *Blastocystis succinyl-CoA synthetase*.” *Mol Microbiol*, 68(6), 1395-1405 (2008) (査読あり)

33. #\* Standley DM, Kinjo A.R., Kinoshita K, Nakamura H. “Protein structure databases with new web services for structural biology and biomedical research.” *Brief Bioinform*, 9(4), 276-285 (2008) (査読あり)
34. Standley DM, Lis M, van der Giezen M, Nakamura H. “Structure-based functional annotation of protein sequences guided by comparative models.” *Proceedings of the Second International Symposium on Optimization and Systems Biology* (ed. Luonan Chen) Lijiang China., 395-403 (2008) (査読あり)
35. Takayama, Y., Werbeck, N. D., Komori, H., Morita, K., Ozawa, K., Higuch, Y., and Akutsu H. “Strategic roles of axial histidines in structure formation and redox regulation of tetraheme cytochrome c3.” *Biochemistry*, 47, 9405-9415 (2008) (査読あり)
36. Tsuchiya, Y., Nakamura, H. and Kinoshita, K. “Discrimination between biological interfaces and crystal-packing contacts.” *Compt Biol Chem*, 1, 99-113 (2008) (査読あり)
37. Miyazawa S, Kinjo A.R., ” Properties of contact matrices induced by pair wise interactions in proteins.” *Physical Review E*, 77, 051910 (2008) (査読あり)
38. Kinjo A.R., Nakamura H. “Nature of protein family signatures: Insights from singular value analysis of position-specific scoring matrices.” *PLoS ONE*, 3: e1963 (2008) (査読あり)
39. # Kinjo, A. R., Nakamura, H. “Comprehensive structural classification of ligand binding motifs in proteins.” *Structure*, 17, 234-246 (2009) (査読あり)
40. # Schwede T, Sali A, Honig B, Levitt M, Berman HM, Jones D, Brenner SE, Burley SK, Das R, Dokholyan NV, Dunbrack RL, Jr., Fidelis K, Fiser A, Godzik A, Huang YJ, Humblet C, Jacobson MP, Joachimiak A, Krystek SR, Jr., Kortemme T, Kryshtafovych A, Montelione GT, Moulton J, Murray D, Sanchez R, Sosnick TR, Standley DM, Stouch T, Vajda S, Vasquez M, Westbrook JD, Wilson IA. “Outcome of a workshop on applications of protein models in biomedical research.” *Structure*, 17(2), 151-159 (2009) (査読あり)
41. # Matsushita K, Takeuchi O, Standley DM, Kumagai Y, Kawagoe T, Miyake T, Satoh T, Kato H, Tsujimura T, Nakamura H, Akira S. “Zc3h12a is an RNase essential for controlling immune responses by regulating mRNA decay.” *Nature*, 458(7242), 1185-1190 (2009) (査読あり)
42. # Dutta, S., Burkhardt, K., Young, J., Swaminathan, G.J., Matsuura, T., Henrick, K., Nakamura, H., Berman, H.M. “Data Deposition and Annotation at the Worldwide Protein Data Bank” *Mol. Biotechnol.*, 42(1), 1-13 (2009) (査読あり)
43. Tsuchiya, Y., Kanamori, E., Nakamura, H., Kinoshita, K., “Classification of hetero-dimer interfaces using docking models and construction of scoring functions

- for the complex structure prediction.” *Adv. Appl. Bioinfo. Chem.*, 2, 79-100 (2009)  
(査読あり)
44. Kinjo, A.R., “Profile conditional random fields for modeling protein families with structural information.” *BIOPHYSICS*, 5, 37-44 (2009) (査読あり)
  45. Yamamoto M, Standley DM, Takashima S, Saiga H, Okuyama M, Kayama H, Kubo E, Ito H, Takaura M, Matsuda T, Soldati-Favre D, Takeda K. “A single polymorphic amino acid on *Toxoplasma gondii* kinase ROP16 determines the direct and strain-specific activation of Stat3.” *J Exp Med.*, 206(12), 2747-2760 (2009) (査読あり)
  46. # Berman, H.M., Kleywegt, G.J., Nakamura, H., Markley, J.L., Burley, S.B., “Safeguarding the integrity of protein archive”, *Nature*, vol. 463 pp.425 (2010)
  47. # Standley DM, Yamashita R, Kinjo A.R., Toh H, Nakamura H., “SeSAW: balancing sequence and structural information in protein functional mapping.” *Bioinformatics*, 26,1258-1259 (2010) (査読あり)
  48. # Kinjo AR, Nakamura H., “Geometric similarities of protein-protein interfaces at atomic resolution are only observed within homologous families: An exhaustive structural classification study.” *Journal of Molecular Biology*, 399, 526-540 (2010)  
(査読あり)
  49. Johansson, F., Toh, H. “Relative von Neumann entropy for evaluating amino acid conservation” , *J Bioinform Comput Biol.*, 8(5), 809-823 (2010) (査読あり)
  50. Shuichi Hirose, Kiyonobu Yokota, Yutaka Kuroda, Hiroshi Wako, Shigeru Endo, Satoru Kanai, Tamotsu Noguchi, “Prediction of protein motions from amino acid sequence and its application to protein-protein interaction” , *BMC Structural Biology*, 10:20 (2010) (査読あり)
  51. #\* Johansson, F., Toh, H. “A comparative study of conservation and variation scores.” *BMC Bioinformatics*, 11, 388 (2010) (査読あり)
  52. W Nunomura, K Kinoshita, M Parra, P Gascard, X An, N Mohandas, and Y Takakuwa, “Similarities and differences in the structure and function of 4.1G and 4.1R135, two protein 4.1 paralogues expressed in erythroid cells.” *Biochem J*, 432, 407-416( 2010) (査読あり)
  53. # \* Kinjo A.R., Yamashita R, Nakamura H., “PDBj Mine: Design and implementation of relational database interface for Protein Data Bank Japan.” *Database*, 2010:baq021 (2010) (査読あり)

54. Katayama T, Arakawa K, Nakao M, Ono K, Aoki-Kinoshita KF, Yamamoto Y, Yamaguchi A, Kawashima S, Chun H-W, Aerts J, Aranda B, Barboza LH, Bonnal RJP, Bruskiwich R, Bryne JC, Fernandez JM, Funahashi A, Gordon PMK, Goto N, Groscurth A, Gutteridge A, Holland R, Kano Y, Kawas EA, Kerhornou A, Kibukawa E, Kinjo AR, Kuhn M, Lapp H, Lehvaslaiho H, et al., “The DBCLS BioHackathon: standardization and interoperability for bioinformatics web services and workflows.” *Journal of Biomedical Semantics*, 1, 8 (2010) (査読あり)
55. Satoh T, Takeuchi O, Vandebon A, Yasuda K, Tanaka Y, Kumagai Y, Miyake T, Matsushita K, Okazaki T, Saitoh T, Honma K, Matsuyama T, Yui K, Tsujimura T, Standley DM, Nakanishi K, Nakai K, Akira S. “The Jmjd3-Irf4 axis regulates M2 macrophage polarization and host responses against helminth infection.” *Nat Immunol.*, 11(10), 879-81 (2010) (査読あり)
56. Teraguchi S, Patil A, Standley D., “Intrinsically disordered domains deviate significantly from random sequences in mammalian proteins.” *BMC Bioinformatics*, 11:S7 (2010) (査読あり)
57. Ikebe J, Standley DM, Nakamura H, Higo J “Ab initio simulation of a 57-residue protein in explicit solvent reproduces the native conformation in the lowest free-energy cluster.” *Protein Science*, 20(1), 187-96 (2010) (査読あり)
58. Liang S, Zhou Y, Grishin N, Standley DM, “Protein Side Chain Modeling with Orientation Dependent Atomic Force Fields Derived by Series Expansions.” *J COMPUT CHEM.* 32(8), 1680-6(2011) (査読あり)
59. A. Patil, K. Kinoshita, H. Nakamura (2010) Domain distribution and intrinsic disorder in hubs in the human protein-protein interaction network. *Protein Science* 19 (8), 1461-1468.
60. Y. Murakami, Ruth Spriggs, H. Nakamura, S. Jones (2010) PiRaNhA: a server for the computational prediction of RNA-binding residues in protein. *Nucl. Acids Res.* 38 (Web server issue) W412-416.
61. M. Lim, T. Kim, J. J. Sarmiento, D. Kuroda, H. V. Dinh, A. R. Kinjo, K. Amada, S. Devadas, H. Nakamura, D. M. Standley (2011) Bridging the gap between single-template and fragment based protein structure modeling using Spanner. *Immunome Res.* 7(1), 1-8 (1 Apr. 2011)
62. Ashwini Patil, Kenta Nakai, Haruki Nakamura (2011) HitPredict: a database of quality assessed protein-protein interactions in 9 species. *Nucleic Acids Research*, 39, Database issue, D744-D749.
63. E. Kanamori, S. Igarashi, M. Osawa, Y. Fukunishi, I. Shimada, H. Nakamura, (2011) Structure determination of a protein assembly by amino acid selective cross-saturation. *PROTEINS*, 79 (1), 179-190.

64. Daisuke Kuroda, Hiroki Shirai, Matthew P. Jacobson, Haruki Nakamura (2012) Computer-aided antibody design. *PEDS* 25(10), 507-521.
  65. # Akira Kinjo, Haruki Nakamura (2012) GIRAF: a method for fast search and flexible alignment of ligand binding interfaces in proteins at atomic resolution. (2012) *Biophysics* 8, 79-94.
  66. # Akira R. Kinjo, Haruki Nakamura (2012) Composite Structural Motifs of Binding Sites for Delineating Biological Functions of Proteins. *PloSONE* 7 (2), e31437.
  67. # Akira R. Kinjo, Hirofumi Suzuki, Reiko Yamashita, Yasuyo Ikegawa, Takahiro Kudou, Reiko Igarashi, Yumiko Kengaku, Hasumi Cho, Daron M. Standley, Atsushi Nakagawa, Haruki Nakamura (2012) Protein Data Bank Japan (PDBj): maintaining a structural data archive and resource description framework format. *Nucleic Acids Research*, 40, Database issue, D453-D460.
  68. # Berman, H.M., Kleywegt, G.J., Nakamura, H., Markley, J.L. (2012) The protein data bank at 40: Reflecting on the past to prepare for the future, *Structure* 20(3), 391-396
  69. Tsuchiya, Y., Nakamura, H., Kinoshita, K. (2012) Discrimination between biological interfaces and crystal-packing contacts, *Advances and Applications in Bioinformatics and Chemistry* 5(1), 99-113
  70. # Berman, H.M., Kleywegt, G.J., Nakamura, H., Markley, J.L. (2013) Mini review: The future of the protein data bank, *Biopolymers* 99(3), 218-222
  71. Sato, J., Kozaki, K., Handa, S., Ikeda, T., Saka, R., Tomizuka, K., Nishiyama, Y., Okumura, T., Hirai, S., Ohno, T., Ohta, M., Date, S., Nakamura, H. (2013) Protein experimental information management system (PREIMS) based on ontology: Development and applications, *IPSJ Transactions on Bioinformatics* 6, 9-17
  72. # Berman, H.M., Kleywegt, G.J., Nakamura, H., Markley, J.L. (2013) How community has shaped the protein data bank, *Structure* 21(9), 1485-1491
- # : 今回の追跡調査において研究代表者が主要な論文として指定したもの (上限 30 報)
- \* : 研究開発期間終了後の終了報告書において研究代表者が主要な論文として指定したもの

## 2. 主要論文の被引用回数

論文	国内外別件数		分野別件数																				出版年別件数								
	国内件数	海外件数	農学	生物学・生化学	化学	臨床医学	コンピュータサイエンス	経済学・経営学	工学	環境・生態学	地球科学	免疫学	材料科学	数学	微生物学	分子生物学・遺伝学	複合領域	神経科学・行動科学	薬理学・毒物学	物理学	植物学・動物学	精神医学・心理学	社会科学・一般	宇宙科学	2006年	2007年	2008年	2009年	2010年	2011年	2012年
2. Berman, H. M., Burley, S. K., Chiu, W., Sail, A., Adzhubei, A., Bourne, P. E., Bryant, S. H., Dunbrack, Jr., R. L., Fidelis, K., Frabk, J., Godzik, A., Henrick, K., Joachimiak, A., Heymann, B., Jones, D., Markley, H. L., Moulton, J., Montelione, G. T., Orengo, C., Rossmann, M. G., Rost, B., Saibil, H., Schwede, T., Standley, D. M., and Westbrook, J. D. "Outcome of a Workshop on Archiving Structural Models of Biological Macromolecules" <i>Structure</i> , 14, 1211-1217 (2006)(査読あり)	3	9	0	5	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	1	0	0	0	0	0	0	4	3	4	0	1	0
4. * Berman, H.M., Henrick, K., Nakamura, H and Markley, J. L. "The worldwide Protein Data Bank (wwPDB): ensuring a single, uniform archive of PDB data" <i>Nucleic Acids Research</i> , 35 Database issue D301-D303 (2006)(査読あり)	24	245	3	115	50	10	27	0	2	0	0	0	5	4	22	0	2	12	8	2	0	0	0	0	0	16	49	64	27	67	46
13. Standley, D.M., Toh, H., Nakamura, H., "ASH structure alignment package: Sensitivity and selectivity in domain classification." <i>BMC Bioinformatics</i> , 8, id.116 (2007)(査読あり)	8	7	0	3	4	3	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	5	2	2	5	1
14. Berman, H.M., Henrick, K., Nakamura, H., Markley, J. L., "Reply to: Buildind meaningful models of glycoproteins." <i>Nature Structure Molecular Biology</i> , 14, 354-355 (2007)	1	15	0	4	6	0	1	0	0	0	0	0	0	0	4	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1	3	3	3	2	4
15. Berman, H.M., Henrick, K., Nakamura, H., Markley, J.L., Bourne, P.E., Westbrook, J., "Realism about PDB." <i>Nature Biotechnology</i> , 25, 845-846 (2007)(査読あり)	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16. Kinoshita, K., Murakami, Y., Nakamura, H., "eF-seek: prediction of the functional sites of proteins by searching for similar electrostatic potential and molecular surface shape." <i>Nucleic Acids Res</i> , 35, W398-402 (2007)(査読あり)	4	13	0	12	1	0	2	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	3	1	6	2	5
22. Henrick, K., Feng, Z., Bluhm, W.F., Dimitropoulos, D., Doreleijers, J.F., Dutta, S., Flippen-Anderson, J.L., Ionides, J., Kamada, C., Krissinel, E., Lawson, C.L., Markley, J.L., Nakamura, H., Newman, R., Shimizu, Y., Swaminathan, J., Velankar, S., Ory, J., E. Ulrich, E.L., Vranken, W., Westbrook, J., Yamashita, R., Yang, H., Young, J., Yousufuddin, M., Berman, H.M., "Remediation of the protein data bank archive." <i>Nucleic Acids Res.</i> , 36, D426-433 (2008) (査読あり)	7	45	1	24	11	2	5	0	0	0	0	1	1	1	4	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	5	16	14	7	10	
24. * Markley, J.L., Ulrich, E.L., Berman, H.M., Henrick, K., Nakamura, H., Akutsu, H., "BioMagResBank (BMRB) as a partner in the Worldwide Protein Data Bank (wwPDB): new policies affecting biomolecular NMR depositions." <i>J. Biomol NMR</i> , 40, 153-155 (2008)(査読あり)	1	19	0	11	5	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	1	0	0	0	0	0	1	3	6	4	6	
25. Standley, D.M., Toh, H., Nakamura, H. "Functional annotation by sequence-weighted structure alignments: Statistical analysis and case studies from the Protein 3000 structural genomics project in Japan." <i>PROTEINS</i> , 72 (4), 1333-1351 (2008)(査読あり)	4	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	2	1	0	0	
27. Katoh, K., Toh, H. "Recent developments in the MAFFT multiple sequence alignment program." <i>Brief. Bioinform.</i> 9 (4), 286-298 (2008)(査読あり)	51	507	2	145	5	53	24	0	0	24	2	11	1	0	55	63	0	1	1	0	169	0	0	0	0	2	54	125	149	228	
28. Eldon L. Ulrich, Hideo Akutsu, Jurgen F. Doreleijers, Yoko Harano, Yannis E. Ioannidis, Jundong Lin, Miron Livny, Steve Mading, Dimitri Maziuk, Zachary Miller, Eiichi Nakatani, Christopher F. Schulte, David E. Tolmie, R. Kent Wenger, Hongyang Yao and John L. Markley, "BioMagResBank." <i>Nucleic Acids Res</i> , 36, D402-408 (2008)(査読あり)	14	203	6	101	55	10	6	0	8	2	0	1	0	0	23	0	0	1	0	1	0	0	0	0	0	14	42	48	54	59	
33. * Standley DM, Kinjo A.R., Kinoshita K, Nakamura H. "Protein structure databases with new web services for structural biology and biomedical research." <i>Brief Bioinform</i> , 9(4), 276-285 (2008)(査読あり)	7	11	0	11	3	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	4	3	6	5	
39. Kinjo, A. R., Nakamura, H. "Comprehensive structural classification of ligand binding motifs in proteins." <i>Structure</i> , 17, 234-246 (2009)(査読あり)	5	6	0	5	2	1	2	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	5	2	4	
40. Schwede T, Sali A, Honig B, Levitt M, Berman HM, Jones D, Brenner SE, Burley SK, Das R, Dokholyan NV, Dunbrack RL, Jr., Fidelis K, Fiser A, Godzik A, Huang YJ, Humblet C, Jacobson MP, Joachimiak A, Krystek SR, Jr., Kortemme T, Kryshtafovych A, Montelione GT, Moulton J, Murray D, Sanchez R, Sosnick TR, Standley DM, Stouch T, Vajda S, Vasquez M, Westbrook JD, Wilson IA. "Outcome of a workshop on applications of protein models in biomedical research." <i>Structure</i> , 17(2), 151-159 (2009)(査読あり)	1	28	0	17	3	1	3	0	0	0	0	1	0	0	3	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	5	3	14	7	
41. Matsushita K, Takeuchi O, Standley DM, Kumagai Y, Kawagoe T, Miyake T, Satoh T, Kato H, Tsujimura T, Nakamura H, Akira S. "Zc3h12a is an RNase essential for controlling immune responses by regulating mRNA decay." <i>Nature</i> , 458(7242), 1185-1190 (2009)(査読あり)	18	42	0	11	0	7	1	0	0	0	14	0	0	4	21	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	5	21	17	17	
42. Dutta, S., Burkhardt, K., Young, J., Swaminathan, G.J., Matsuura, T., Henrick, K., Nakamura, H., Berman, H.M. "Data Deposition and Annotation at the Worldwide Protein Data Bank" <i>Mol. Biotechnol.</i> , 42(1), 1-13 (2009)(査読あり)	3	39	1	23	8	1	5	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	1	17	15	9		
46. Berman, H.M., Kleywegt, G.J., Nakamura, H., Markley, J.L., Burley, S.B., "Safeguarding the integrity of protein archive", <i>Nature</i> , vol. 463 pp.425 (2010)	0	2	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	

論文	国内外別件数		分野別件数																				出版年別件数								
	国内件数	海外件数	農学	生物学・生化学	化学	臨床医学	コンピュータサイエンス	経済学・経営学	工学	環境・生態学	地球科学	免疫学	材料科学	数学	微生物学	分子生物学・遺伝学	複合領域	神経科学・行動科学	薬理学・毒物学	物理学	植物学・動物学	精神医学・心理学	社会科学・一般	宇宙科学	2006年	2007年	2008年	2009年	2010年	2011年	2012年
47. Standley DM, Yamashita R, Kinjo A.R., Toh H, Nakamura H., "SeSAW: balancing sequence and structural information in protein functional mapping." <i>Bioinformatics</i> , 26,1258-1259 (2010) (査読あり)	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	0	0	1
48. Kinjo AR, Nakamura H., "Geometric similarities of protein-protein interfaces at atomic resolution are only observed within homologous families: An exhaustive structural classification study." <i>Journal of Molecular Biology</i> , 399, 526-540 (2010) (査読あり)	2	3	0	2	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	0	1	4
51. * Johansson, F., Toh, H. "A comparative study of conservation and variation scores." <i>BMC Bioinformatics</i> , 11, 388 (2010)(査読あり)	0	2	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	0	0	2
53. * Kinjo A.R., Yamashita R, Nakamura H., "PDBj Mine: Design and implementation of relational database interface for Protein Data Bank Japan." <i>Database</i> , 2010:baq021 (2010) (査読あり)	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	0	0	1
66. Akira R. Kinjo, Haruki Nakamura (2012) Composite Structural Motifs of Binding Sites for Delineating Biological Functions of Proteins. <i>PLoS ONE</i> 7 (2), e31437.	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	0
67. Akira R. Kinjo, Hirofumi Suzuki, Reiko Yamashita, Yasuyo Ikegawa, Takahiro Kudou, Reiko Igarashi, Yumiko Kengaku, Hasumi Cho, Daron M. Standley, Atsushi Nakagawa, Haruki Nakamura (2012) Protein Data Bank Japan (PDBj): maintaining a structural data archive and resource description framework format. <i>Nucleic Acids Research</i> , 40, Database issue, D453-D460.	0	2	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	2
68. Berman, H.M., Kleywegt, G.J., Nakamura, H., Markley, J.L. (2012) The protein data bank at 40: Reflecting on the past to prepare for the future, <i>Structure</i> 20(3), 391-396	0	3	0	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	3

- ・本追跡調査において研究代表者が主要な論文として指定したもの（上限 30 報）について、トムソン・ロイター社 Web of Science で調査した。調査対象は、2012 年 12 月まで。被引用情報が取得できたもののみ記載した。
- ・論文番号は「資料編 1. 論文リスト」に対応している。
- ・\*：研究開発期間終了後の終了報告書において研究代表者が主要な論文として指定したもの。
- ・[国内外別件数] は、被引用文献の国内外別件数。被引用文献の著者の所属国のうち JAPAN が一つでもあれば国内としている。国内外の合計が全被引用文献数となる。
- ・[分野別件数] は、被引用文献の分野別件数。被引用文献が論文の場合のみカウントしている。
- ・[出版年別件数] は、被引用文献の出版年別件数。「-」は、データなしを表す。

論文	Web of Science 国内外別件数(2012年12月まで)			Google Scholar	
	国内件数	海外件数	合計	~2014年4月24日	~2012年
2. Berman, H. M., Burley, S. K., Chiu, W., Sail, A., Adzhubei, A., Bourne, P. E., Bryant, S. H., Dunbrack, Jr., R. L., Fidelis, K., Frabk, J., Godzik, A., Henrick, K., Joachimiak, A., Heymann, B., Jones, D., Markley, H. L., Moul, J., Montelione, G. T., Orengo, C., Rossmann, M. G., Rost, B., Saibil, H., Schwede, T., Standley, D. M., and Westbrook, J. D. "Outcome of a Workshop on Archiving Structural Models of Biological Macromolecules" <i>Structure</i> , 14, 1211- 1217 (2006) (査読あり)	3	9	12	26	20
4. * Berman, H.M. , Henrick, K, Nakamura, H and Markley, J. L. "The worldwide Protein Data Bank (wwPDB): ensuring a single, uniform archive of PDB data" <i>Nucleic Acids Research</i> , 35 Database issue D301-D303 (2006)(査読あり)	24	245	269	545	449
13. Standley, D.M., Toh, H., Nakamura, H., "ASH structure alignment package: Sensitivity and selectivity in domain classification." <i>BMC Bioinformatics</i> , 8, id.116 (2007)(査読あり)	8	7	15	24	23
14. Berman, H.M., Henrick, K., Nakamura, H., Markley, J. L., "Reply to: Building meaningful models of glycoproteins." <i>Nature Structure Molecular Biology</i> , 14, 354-355 (2007)	1	15	16	(文献探せず)	(文献探せず)
15. Berman, H.M., Henrick, K., Nakamura, H., Markley, J.L., Bourne, P.E., Westbrook, J., "Realism about PDB." <i>Nature Biotechnology</i> , 25, 845-846 (2007)(査読あり)	0	0	0	12	7

16. Kinoshita, K., Murakami, Y., Nakamura, H., "eF-seek: prediction of the functional sites of proteins by searching for similar electrostatic potential and molecular surface shape." <i>Nucleic Acids Res.</i> 35, W398-402 (2007)(査読あり)	4	13	17	37	29
22. Henrick, K., Feng, Z., Bluhm, W.F., Dimitropoulos, D., Doreleijers, J.F., Dutta, S., Flippen-Anderson, J.L., Ionides, J., Kamada, C., Krissinel, E., Lawson, C.L., Markley, J.L., Nakamura, H., Newman, R., Shimizu, Y., Swaminathan, J., Velankar, S., Ory, J., E. Ulrich, E.L., Vranken, W., Westbrook, J., Yamashita, R., Yang, H., Young, J., Yousufuddin, M., Berman, H.M., "Remediation of the protein data bank archive." <i>Nucleic Acids Res.</i> , 36, D426-433 (2008) (査読あり)	7	45	52	108	88
24. * Markley, J.L., Ulrich, E.L., Berman, H.M., Henrick, K., Nakamura, H., Akutsu, H., "BioMagResBank (BMRB) as a partner in the Worldwide Protein Data Bank (wwPDB): new policies affecting biomolecular NMR depositions." <i>J. Biomol NMR</i> , 40, 153-155 (2008)(査読あり)	1	19	20	41	28
25. Standley, D.M., Toh, H., Nakamura, H. "Functional annotation by sequence-weighted structure alignments: Statistical analysis and case studies from the Protein 3000 structural genomics project in Japan." <i>PROTEINS</i> , 72 (4), 1333-1351 (2008)(査読あり)	4	0	4	8	7
27. Katoh, K., Toh, H. "Recent developments in the MAFFT multiple sequence alignment program." <i>Brief. Bioinform.</i> 9 (4), 286-298 (2008)(査読あり)	51	507	558	1340	868
28. Eldon L. Ulrich, Hideo Akutsu, Jurgen F. Doreleijers, Yoko Harano, Yannis E. Ioannidis, Jundong Lin, Miron Livny, Steve Mading, Dimitri Maziuk, Zachary Miller, Eiichi Nakatani, Christopher F. Schulte, David E. Tolmie, R. Kent Wenger, Hongyang Yao and John L. Markley, "BioMagResBank." <i>Nucleic Acids Res.</i> 36, D402-408 (2008)(査読あり)	14	203	217	434	306
33. * Standley DM, Kinjo A.R., Kinoshita K, Nakamura H. "Protein structure databases with new web services for structural biology and biomedical research." <i>Brief Bioinform.</i> 9(4), 276-285 (2008)(査読あり)	7	11	18	31	25
39. Kinjo, A. R., Nakamura, H. "Comprehensive structural classification of ligand binding motifs in proteins." <i>Structure</i> , 17, 234-246 (2009)(査読あり)	5	6	11	20	15
40. Schwede T, Sali A, Honig B, Levitt M, Berman HM, Jones D, Brenner SE, Burley SK, Das R, Dokholyan NV, Dunbrack RL, Jr., Fidelis K, Fiser A, Godzik A, Huang YJ, Humblet C, Jacobson MP, Joachimiak A, Krystek SR, Jr., Kortemme T, Kryshtafovych A, Montelione GT, Moulton J, Murray D, Sanchez R, Sosnick TR, Standley DM, Stouch T, Vajda S, Vasquez M, Westbrook JD, Wilson IA. "Outcome of a workshop on applications of protein models in biomedical research." <i>Structure</i> , 17(2), 151-159 (2009)(査読あり)	1	28	29	58	40
41. Matsushita K, Takeuchi O, Standley DM, Kumagai Y, Kawagoe T, Miyake T, Satoh T, Kato H, Tsujimura T, Nakamura H, Akira S. "Zc3h12a is an RNase essential for controlling immune responses by regulating mRNA decay." <i>Nature</i> , 458(7242), 1185-1190 (2009)(査読あり)	18	42	60	148	83
42. Dutta, S., Burkhardt, K., Young, J., Swaminathan, G.J., Matsuura, T., Henrick, K., Nakamura, H., Berman, H.M. "Data Deposition and Annotation at the Worldwide Protein Data Bank" <i>Mol. Biotechnol.</i> , 42(1), 1-13 (2009)(査読あり)	3	39	42	76	58
46. Berman, H.M., Kleywegt, G.J., Nakamura, H., Markley, J.L., Burley, S.B., "Safeguarding the integrity of protein archive", <i>Nature</i> , vol. 463 pp.425 (2010)	0	2	2	4	3
47. Standley DM, Yamashita R, Kinjo A.R., Toh H, Nakamura H., "SeSAW: balancing sequence and structural information in protein functional mapping." <i>Bioinformatics</i> , 26,1258-1259 (2010) (査読あり)	1	0	1	7	6
48. Kinjo AR, Nakamura H., "Geometric similarities of protein-protein interfaces at atomic resolution are only observed within homologous families: An exhaustive structural classification study." <i>Journal of Molecular Biology</i> , 399, 526-540 (2010) (査読あり)	2	3	5	15	12
51. * Johansson, F., Toh, H. "A comparative study of conservation and variation scores." <i>BMC Bioinformatics</i> , 11, 388 (2010)(査読あり)	0	2	2	12	3
53. * Kinjo A.R., Yamashita R, Nakamura H., "PDBj Mine: Design and implementation of relational database interface for Protein Data Bank Japan." <i>Database</i> , 2010:baq021 (2010) (査読あり)	1	0	1	5	4
65. Akira Kinjo, Haruki Nakamura (2012) GIRAF: a method for fast search and flexible alignment of ligand binding interfaces in proteins at atomic resolution. (2012) <i>Biophysics</i> 8, 79-94.	—	—	—	1	0
66. Akira R. Kinjo, Haruki Nakamura (2012) Composite Structural Motifs of Binding Sites for Delineating Biological Functions of Proteins. <i>PLoS ONE</i> 7 (2), e31437.	0	0	0	3	2

67. Akira R. Kinjo, Hirofumi Suzuki, Reiko Yamashita, Yasuyo Ikegawa, Takahiro Kudou, Reiko Igarashi, Yumiko Kengaku, Hasumi Cho, Daron M. Standley, Atsushi Nakagawa, Haruki Nakamura (2012) Protein Data Bank Japan (PDBj): maintaining a structural data archive and resource description framework format. Nucleic Acids Research, 40, Database issue, D453-D460.	0	2	2	27	6
68. Berman, H.M., Kleywegt, G.J., Nakamura, H., Markley, J.L. (2012) The protein data bank at 40: Reflecting on the past to prepare for the future, Structure 20(3), 391-396	0	3	3	33	12
70. Berman, H.M., Kleywegt, G.J., Nakamura, H., Markley, J.L. (2013) Mini review: The future of the protein data bank, Biopolymers 99(3), 218-222	-	-	-	14	-
72. Berman, H.M., Kleywegt, G.J., Nakamura, H., Markley, J.L. (2013) How community has shaped the protein data bank, Structure 21(9), 1485-1491	-	-	-	2	-

・情報科学・計算機科学分野における研究開発成果では、会議予稿集での発表に引用されることが多いため、Google Scholar での被引用件数を参考情報として添付した。

・Google での調査方法

対象論文のタイトルを検索し、当該論文を「引用元」とする件数を取得した。

「文献探せず」とあるのはその文献がヒットしなかったもの。

最新の被引用件数と、それから 2013 年以降の被引用件数を引いたものを 2012 年までとした。ただし、年が明確でないものは引かれていないため、2012 年までの被引用件数が実際よりも多くなっている可能性がある。

・論文番号は「資料編 1. 論文リスト」に対応している。

・\* : 研究開発期間終了後の終了報告書において研究代表者が主要な論文として指定したもの。

### 3. 学会招待講演・基調講演

1. 中村春木（阪大蛋白研）“PDBML: Impact of the new PDB format and its application to GRID”, Grid Asia, Life Sciences VGC Symposium, (Singapore Management University, Singapol) 2006年5月16日発表
2. 中村春木（阪大蛋白研）“アナログ情報としての蛋白質構造データの記述と検索”、言語から読み解くゲノムと生命システム・シンポジウム、(新大阪ワシントンホテル、大阪) 2006年5月28日発表
3. 中村春木（阪大蛋白研）“Integrated Web Services for Database Queries and Computations”、PRAGMA11 Workshop、(大阪大学コンベンションセンター、大阪) 2006年10月16日発表
4. 中村春木(阪大蛋白研)“アナログ情報としての蛋白質構造データの構造的記述と検索”、第3回大阪大学ナノテクノロジーセンター研究会、(大阪大学産業科学研究所、大阪)、2006年10月31日発表
5. Nakamura, H. (IPR, Osaka Univ.), “Structural Features of Hubs in Protein-Protein Interaction Networks,” Protein ASSEMBLY, DYNAMICS AND FUNCTION, (Institut des Haute Etudes Scientifiques, Paris) 2007年1月11日発表
6. 中村春木（阪大蛋白研）“蛋白質構造情報から蛋白質機能情報へ”、蛋白質3000総合シンポジウム 東京（東京国際フォーラム、東京）2007年2月27日発表
7. 中村春木（阪大蛋白研）“情報とシステム 2007” 情報・システム研究機構シンポジウム、（一橋記念講堂、東京）2007年3月1日発表
8. Nakamura, H.(IPR, Osaka Univ.), “Structural Features of Hubs in Protein-Protein Interaction Networks”, 上海大学セミナー、(上海大学 Institute of Systemes Biology, 上海) 2007年3月29日発表
9. Nakamura, H. (IPR, Osaka Univ.), “The PDBj and wwPDB”, The 6th China-Japan-Korea Bioinformatics Training Collogquium, (上海交通大学、上海), 2007年3月29日発表
10. 中村春木（阪大蛋白研）、蛋白質相互作用への計算科学・情報科学からのアプローチ：新しいパラダイムの解析に向けて（理研シンポジウム「計算機と生物学」、和光）2007年6月22日発表
11. Nakamura, H. (IPR, Osaka Univ.), “PDBj”, wwPDB Retreat Mini-symposium at Princeton, (Chauncy Conference Center, Princeton, USA), 2007年9月8日発表
12. Nakamura, H. (IPR, Osaka Univ.), “Validation and Integration of Protein 3D Structure Information.” Symposium on Bioinformatics and Chemical Genomics, (はるるプラザ京都、京都) 2007年9月2日発表
13. 中村春木（阪大蛋白研）、ライフサイエンスデータベース統合に関する各省の取組と今

後に向けたパネルディスカッション. 総合科学技術会議・科学技術連携施策群 ” 生命科学の基礎・基盤連携群シンポジウム・ライフサイエンスデータベース統合への取組 (” 内閣府主催、浜離宮朝日ホール, 東京) 2007 年 11 月 29 日発表

14. 中村春木(阪大蛋白研) “Structural Bioinformatics Analysis and Prediction of Protein Interactions”, 蛋白質立体構造解析 NEDO 特別講座国際シンポジウム (東京大学大学院薬学研究科、東京) 2008 年 1 月 28 日発表
15. Standley, D. M. (JST-BIRD) “Functional annotation of structural genomics targets by sequence-weighted structure alignments” The 7th China-Japan-Korean Bioinformatics Training Course & a Bioinformatic Conference, (International Center, Jeju National University, Korea) 2008 年 3 月 20 日発表
16. Nakamura, H (IPR, Osaka Univ.), “Validation and Integration of Protein 3D Structure Information” , BIT’ S1st Annual Protein Conference (PepCon-2008), (Shenzen Convention & Exhibition Center, China) 2008 年 4 月 22 日発表
17. 藤原敏道 (阪大蛋白研) , “Solid-state NMR for structural analysis of biomolecular complexes” Korea-Japan Bilateral Symposium on Biological NMR, (Seoul National Univ., Seoul) 2008 年 4 月 25 日発表
18. Nakamura, H. (IPR, Osaka Univ.), “Development of Protein Structure Databases and their Applications to Functional Annotation” , PRICPS 2008, (Cairns Convention Center, Australia) 2008 年 6 月 23 日発表
19. Standley, D. M. (JST-BIRD), “Protein interactions from a comparative perspective”, Workshop on Application of Protein Models in Biomedical Research (Univ. of California, USA) 2008 年 7 月 11 日発表
20. 松浦孝範 (阪大蛋白研)、 “Deposit Your Data to PDBj (for easier and more complete deposition)” , CCP4 workshop 2008 in Tokyo (東京大学駒場キャンパス、東京) 2008 年 9 月 5 日発表
21. Nakamura, H., (IPR, Osaka Univ.), “Tutorials for PDBj search tools” , EMBO Workshop (EMBL-EBI, UK) 2008 年 9 月 26 日発表
22. Nakamura, H., (IPR, Osaka Univ.), “Protein functional annotation from pattern recognition for 3D structures: Similarity search of protein folds, local atomic arrangements, and molecular surfaces with physicochemical properties” (Key Note Lecture), 3rd IAPR International Conference on Pattern Recognition in Bioinformatics (PRIB 2008), (Novotel St Kilda, Melbourne) 2008 年 10 月 15 日発表
23. Nakamura, H., (IPR, Osaka Univ.), "Standardization, Validation and Integration of Protein 3D Structure Information", 4th International Symposium for Standard and Reference Data (Daejeon, Korea) 2008 年 10 月 28 日発表
24. 中村春木 (阪大蛋白研)、 “Expect for Database Center for Life Science : 統合データベースのインパクトと将来への期待” 第 46 回日本生物物理学会年会シンポジウム「動

- き出したライフサイエンス統合データベース」(福岡国際会議場・福岡) 2008年12月4日発表
25. 中村春木(阪大蛋白研)、“蛋白質構造データバンク事業と国際的な展開” 統合データベースプロジェクト「データベースが拓くこれからのライフサイエンス」(武田ホール、東京) 2009年6月12日発表
  26. Nakamura, H., (IPR, Osaka Univ.) “Structural modeling of proteins: Principle and application to an ion channel”, The 36th Congress of the International Union of Physiological Sciences, (国立 京都国際会館、京都) 2009年7月29日発表
  27. 中村春木(阪大蛋白研) “構造バイオインフォマティクス入門: 何ができるか? どう使うのか?” 生化若手勉強会(神戸セミナーハウス、神戸) 2009年8月29日発表
  28. Nakamura, H., (IPR, Osaka Univ.) “Electronic structures of biological molecules with their dynamic environments”, International Conference on Physics Biology Interface (ICPBI-2009) (Key Note Lecture), (Saha Institute of Nuclear Physics, Kolkata, India), 2009年12月15日発表
  29. Nakamura, H., (IPR, Osaka Univ.) “Bioinformatics and computational approaches to structural features in protein-protein interactions”, Bose Institute Seminar (Bose Institute, Kolkata, India), 2009年12月16日発表
  30. Nakamura, H., (IPR, Osaka Univ.) “New and powerful method for in-silico drug screening and its applications”, IICB Seminar (Indian Institute of Chemical Biology, Kolkata, India), 2009年12月16日発表
  31. Nakamura, H., (IPR, Osaka Univ.) “Bioinformatics and computational approaches to structural features in protein-protein interactions”, IISc Seminar (Indian Institute of Science, Bangalore, India), 2009年12月17日発表
  32. Nakamura, H. (IPR, Osaka Univ.) “New and powerful method for in-silico drug screening and its applications” および “Prediction of function and protein-protein interaction by structural bioinformatics approach”, IBAB Seminar (Institute of Bioinformatics and Applied Biotechnology, Bangalore, India), 2009年12月18日発表
  33. Johansson, F. (MIB, Kyusyu Univ.) , Toh, H. (MIB, Kyusyu Univ.) “A comparative study of conservation and variation scores.” , The Eighth Asia Pacific Bioinformatics Conference, (Indian Institute of Science, Bangalore, India), 2010年1月21日発表
  34. Nakamura, H. (IPR, Osaka Univ.) “Structural Bioinformatics: Databases and Analyses”, The 9th China-Japan-Korea Bioinformatics Training Course and Bioinformatics Symposium, (Shanghai Institutes for Biological Sciences, Chinese Academy of Sciences, Shanghai, China), 2010年4月21日発表
  35. Nakamura, H. (IPR, Osaka Univ.) “Bioinformatics and Computational Approaches

- to Structural Features in Protein Interactions for in-silico Drug Development”, The 1st International Conference on Frontier4s of Regenerative Medicine and Biomedical Science, (Jinan University, Guangzhou, China), 2010年5月14日発表
36. 中村春木 (阪大蛋白研)、“大量データと大規模計算機による蛋白質の構造・機能解析” 第10回日本蛋白質科学会年会シンポジウム「蛋白質研究法 先進計測・解析技術の最新展開」(札幌コンベンションセンター・札幌) 2010年6月16日発表
  37. 金城玲 (阪大蛋白研)「原子レベルの立体構造を通してみるアミノ酸配列と蛋白質機能の関係」 数学の展開 - 諸分野との連携を探る、(東北大学、仙台) 2010年11月26日発表
  38. Nakamura, H., (IPR, Osaka Univ.) “PDBj: Protein structural database and query system for protein functions”, International CD and Bioinformatics Conference (Warwick University, UK), 2010年12月3日発表
  39. Kinjo, AR., (IPR, Osaka Univ.), “Exhaustive comparative study of interaction site structures in proteins”, Implications for function prediction Biological Data Evaluation Workshop, (Asia Pacific Bioinformatics Conference, Incheon, Korea) 2011年1月12日発表
  40. 小林直宏, “NMR データと構造アンサンブル、解析手法の基礎と応用”, 第2回若手育成講習会 NMRによるタンパク質解析法の基礎的理解(概論と実習), 大阪, 2011年4月26日発表
  41. 中村春木, “大量データと大規模計算機による蛋白質の分子シミュレーション”, 第8回大阪大学医工学情報連携シンポジウム、大阪大学銀杏会館、2011年7月6日発表
  42. 児嶋長次郎, “超高磁場 NMR のための高感度測定技術”, 大阪大学蛋白質研究所セミナー「先端的 NMR 拠点から生まれる新たな潮流: 最新成果、役割、利用」、大阪(吹田)、2011年7月28-29日発表
  43. 金城玲, “Composite structural motifs of binding sites for delineating biological functions of proteins.”, 第3回生体分子研究会、名古屋工業大、愛知、2011年12月20日
  44. Haruki Nakamura, “Intrinsically Disordered Proteins and Development of Corresponding Drugs (Plenary Lecture)”, Computer Aided Drug Design 2011, Penang-Malaysia, 2011年12月5日
  45. Akira R. Kinjo, “Composite structural motifs of binding sites for delineating biological functions of proteins Recent advances in physical and chemical biology”, Saha Institute of nuclear physics, Kolkata, India, 2012年3月5-7日
  46. 金城玲, “PDBデータの読み解き方: mmCIFとPDBML” バイオインフォマティクス講習会2012 生物情報データベース入門、北海道大学、2012年8月9日
  47. Daron M. Standley, “A structural view of immunology”, RIKEN RCAI Seminar

Series 2012 Toward Integrative Medical Biology, Yokohama, 2012 年 12 月 18 日

48. 中村春木、“Drug Development for a GPCR with in-silico screening”、Nagoya symposium,名古屋大学豊田講堂, 2013 年 1 月 24 日
49. 中村春木、“生命科学における情報科学・計算科学”、第 6 回三大学連携シンポジウム, 神戸大学統合研究拠点, 2013 年 2 月 22 日
50. 金城玲、“On the optimal contact potential and sequence conservation modes of proteins”、タンパク質討論会、産総研 CBRC (東京)、2013 年 3 月 2 日
51. 金城玲、“Composite structural motifs for delineating biological functions of proteins”、第 54 回植物生理学会、岡山大学、2013 年 3 月 21 日
52. Daron M. Standley, “Functional Annotation of Intrinsically Disordered Domains by Their Amino Acid Content Using IDD Navigator”, Pacific Symposium on Biocomputing, Hawaii, USA, Jan 6, 2012
53. Haruki Nakamura, A new non-Ewald scheme: The zero-dipole summation method and its applications to molecular dynamics simulations for homogeneous and inhomogeneous biomolecular systems, National Symposium on Frontiers of Biophysics, Biotechnology & Bioinformatics and 37'th Annual Meeting of Indian Biophysical Society, University of Mumbai, India, Jan 14, 2013.
54. Haruki Nakamura, Computational Prediction and Analysis of Protein-Protein Interactions: Qualitative and Quantitative Approaches, Special Seminar at Academia Sinica, Shanghai, Jan 18, 2013.

#### 4. 新聞発表等（著作権の関係により非公開）

#### 5. 特許出願・成立

該当なし

#### 6. 学会賞等の受賞

1. 「文部科学大臣表彰若手科学者賞」、受賞者名：金城玲、2012 年 4 月 9 日
2. 「平成 24 年大阪大学総長顕彰（社会・国際貢献部門：PDBj 活動への貢献）」  
受賞者名：中村春木、2012 年 8 月 1 日

## 7. グラントの獲得実績

1. 動的構造に基づく定量的な蛋白質間相互作用システムの計算・情報科学研究  
中村 春木 2011-2013 年 基盤研究(B)
2. 構造インタラクトームの計算・情報科学による研究  
中村 春木 2008-2010 年 基盤研究(B)
3. 蛋白質構造データバンクの国際的な構築と統合化  
中村 春木 2011-2013 年 ライフサイエンスデータベース統合推進事業 統合化推進プログラム

## 8. 書籍等の執筆実績

1. 神谷 成敏・肥後 順一・福西 快文・中村 春木「タンパク質計算科学」 (2009)共立出版 (株) , 東京.
2. 中村 春木, 「7章タンパク質のデータベースとインフォマティクス」 やさしい原理からはいるタンパク質科学実験法: タンパク質のはたらきを知る-分子機能と生体作用- (長谷・高尾・高木編) , pp. 135-165 (2009). (株) 化学同人, 京都.
3. Eiji Kanamori, Yoichi Murakami, Joy Sarmiento, Shide Liang, Daron M. Standley, Matsuyuki Shirota, Kengo Kinoshita, Yuko Tsuchiya, Junichi Higo, Haruki Nakamura, "Prediction of Protein-Protein Complex Structures", Biomolecular Forms and Functions: A Celebration of 50 years of the Ramachandran Map (Eds. Manju Bansal & N. Srinivasan), World Scientific Publishing, pp. 160-172, 2013.
4. 中村春木「プロローグ-人体は何でできているのか?」「タンパク質は形が命」、Newton 別冊、pp.6-18、pp.84-116、2013 年

## 9. 総説の執筆実績

1. 中村春木「蛋白質の構造から機能推定へ: 構造バイオインフォマティクスによる解析」蛋白質核酸酵素(2008), Vol. 53, 638-644.
2. 中村春木, 月原富武「タンパク 3000 プロジェクトの産んだもの: 特集にあたって」 蛋白質核酸酵素(2008) Vol. 53, 597-599.

3. 中村春木 「蛋白質構造データバンク PDB と PDBj の誕生」 蛋白質核酸酵素 (2008), Vol. 53, 185.
4. 中村春木「蛋白質構造情報の高度化と統合データベース」 蛋白質核酸酵素 (2007), Vol. 52, 1897-1905.
5. 中村春木 「技術としてのバイオインフォマティクスから科学としてのバイオインフォマティクスへ」 蛋白質核酸酵素(2006), Vol. 51, No. 12, 1710-1711.
6. 中村春木 「バックボーンデータベースの標準化: PDBj」 特集 「バイオデータベースの今」 情報処理学会会誌 (2006), Vol. 47, No. 3, 222-226.
7. 中村春木 「ビッグデータ時代に向けた Protein Data Bank (PDB)の取り組み」、生物物理、vol. 53(1)、 pp.44-46、2013 年

**10. 参加研究者の活動状況（個人情報が含まれるため非公開）**