

# バイオインフォマティクス研究における 種々のライフサイエンスデータベースの高度利用

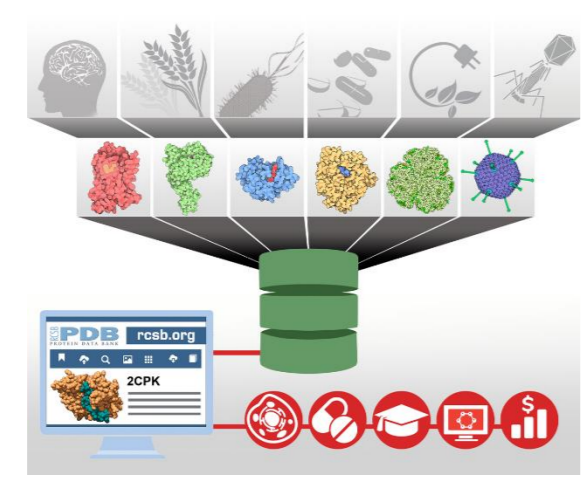
○石井清一郎<sup>1</sup>, 土門優作<sup>1</sup>, 吉田尚恵<sup>1,2</sup>, 武田伊織<sup>1</sup>, 小野洋一<sup>3</sup>, 中野善夫<sup>4</sup>, 山岸賢司<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>日本大学大学院工学研究科, <sup>2</sup>JSPS特別研究員DC, <sup>3</sup>日本大学産官学連携知財センター, <sup>4</sup>日本大学歯学部

## 生体分子に対する分子シミュレーション解析

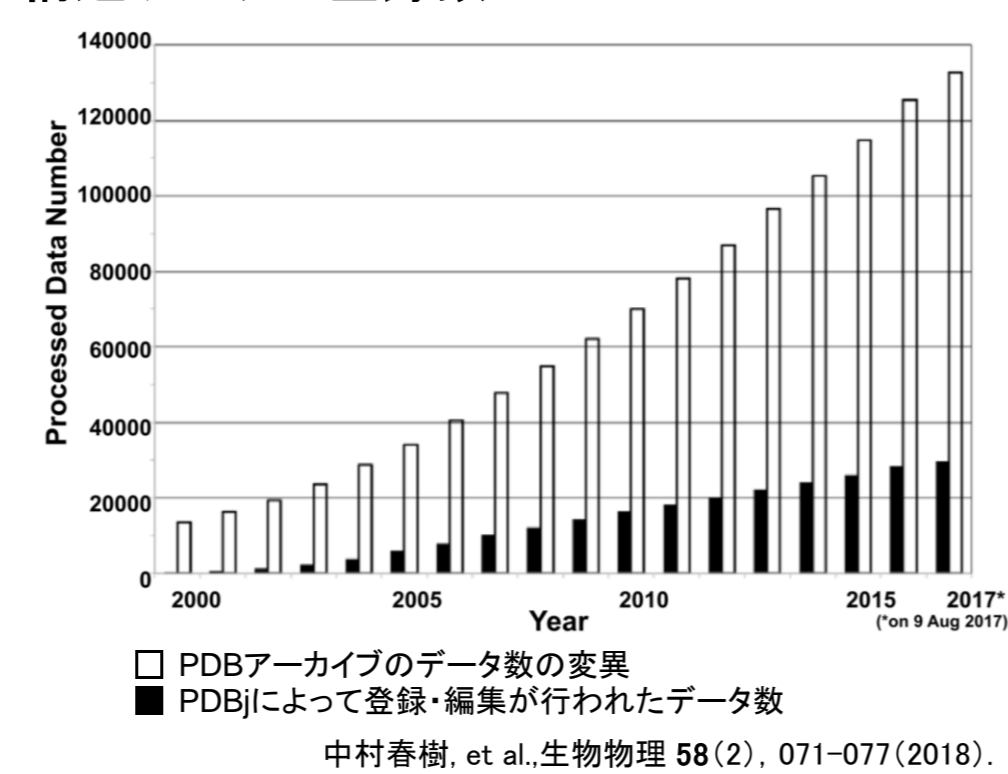
### Protein Data Bank



The Protein Data Bank (PDB) was established as the 1st open access digital data resource in all of biology and medicine. It is today a leading global resource for experimental data central to scientific discovery.

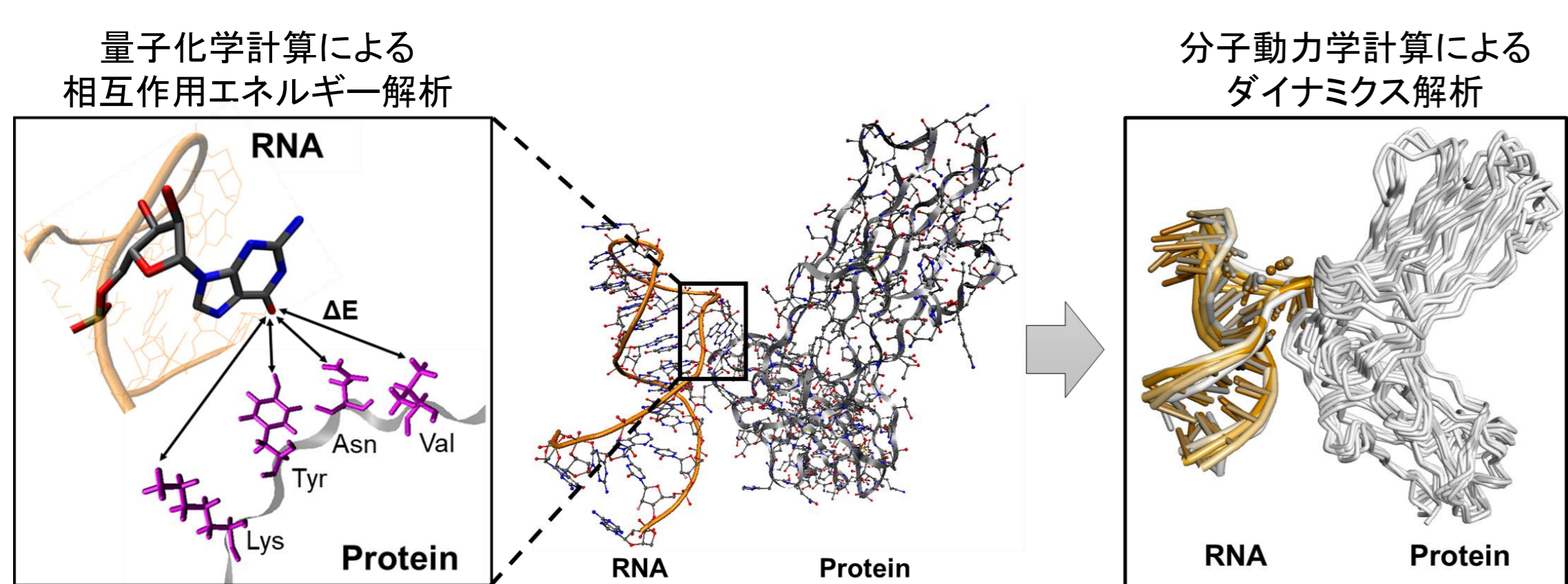


### 構造データの登録数



□ PDBアーカイブのデータ数の変異  
 ■ PDBによって登録・編集が行われたデータ数  
 中村春樹, et al. 生物物理 58(2), 071-077(2018).

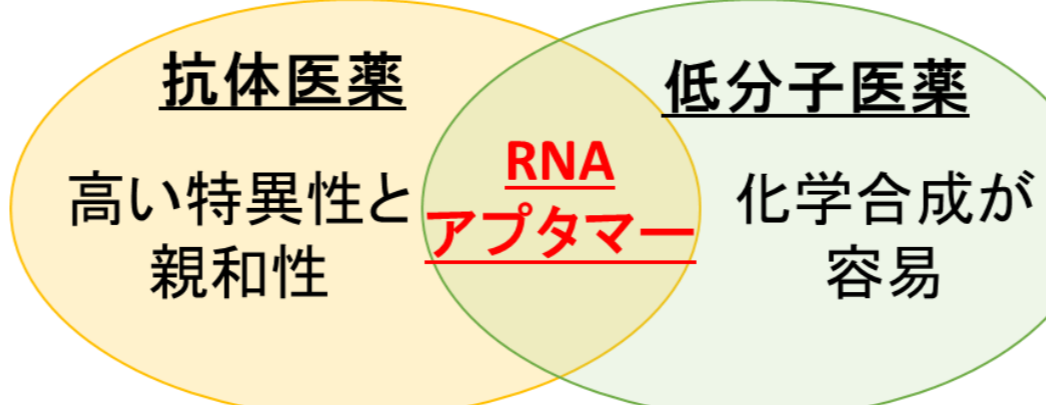
### 生体分子に対する分子シミュレーション解析



### 新機能的核酸分子の設計

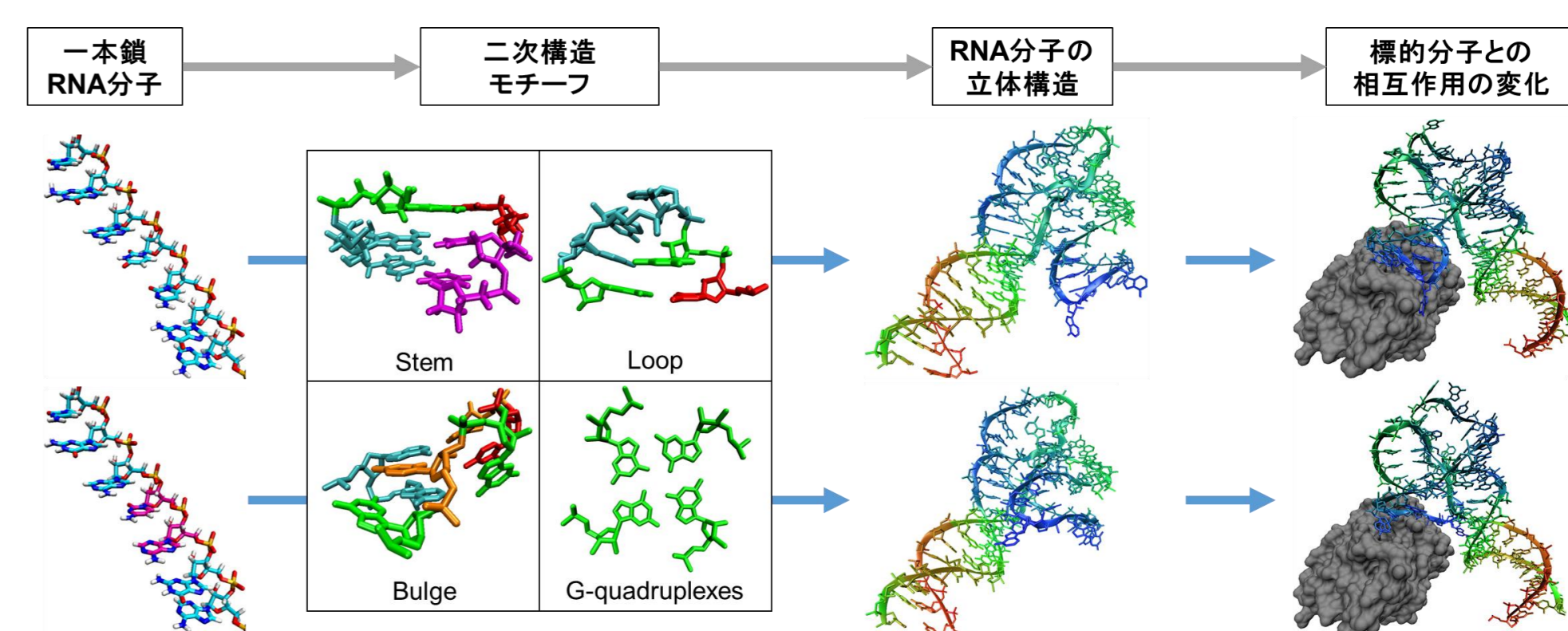
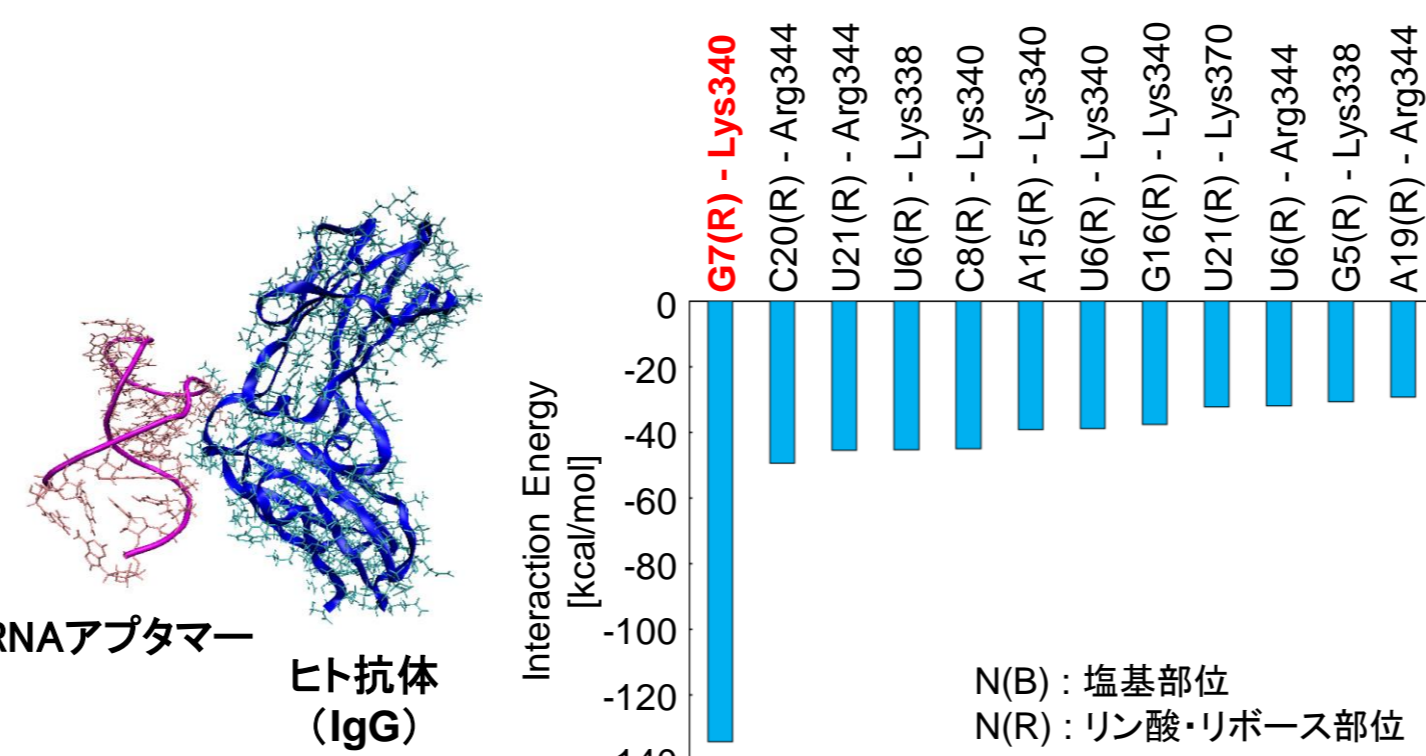
#### 核酸分子 (RNA アプタマー)

- 約20~80塩基からなる一本鎖の短いRNA分子
- 柔軟性が高く、多様な立体構造を形成することが可能



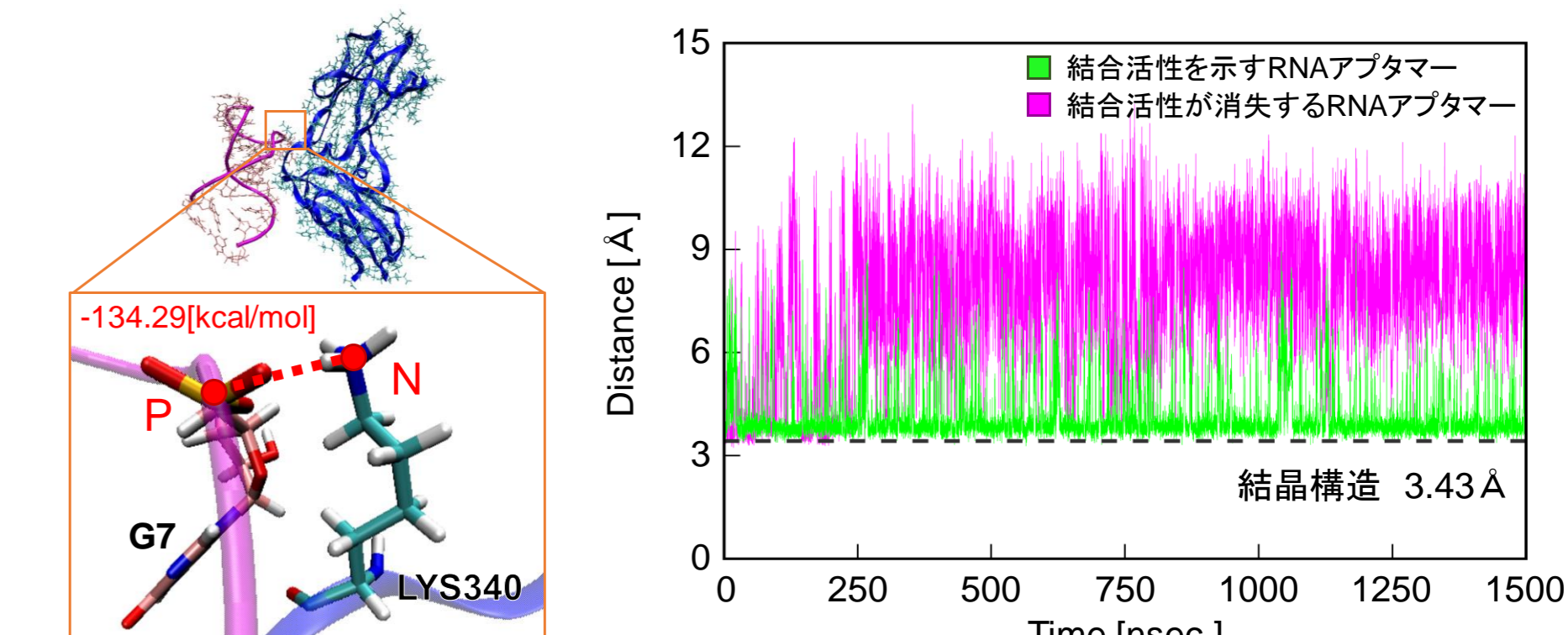
医薬品や新機能的分子として多くのポテンシャルをもつ

#### 抗体とRNAアプタマーとの相互作用解析



塩基配列の違いや化学修飾がRNAアプタマーの立体構造に与える影響の解析

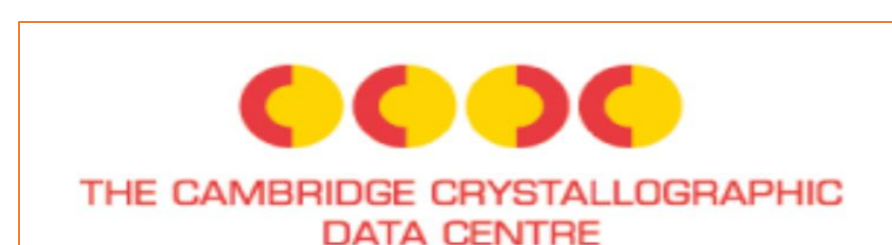
#### 抗体とRNAアプタマーとの複合体構造に対するダイナミクスの解析



## AR技術を用いた分子構造表示システムの開発

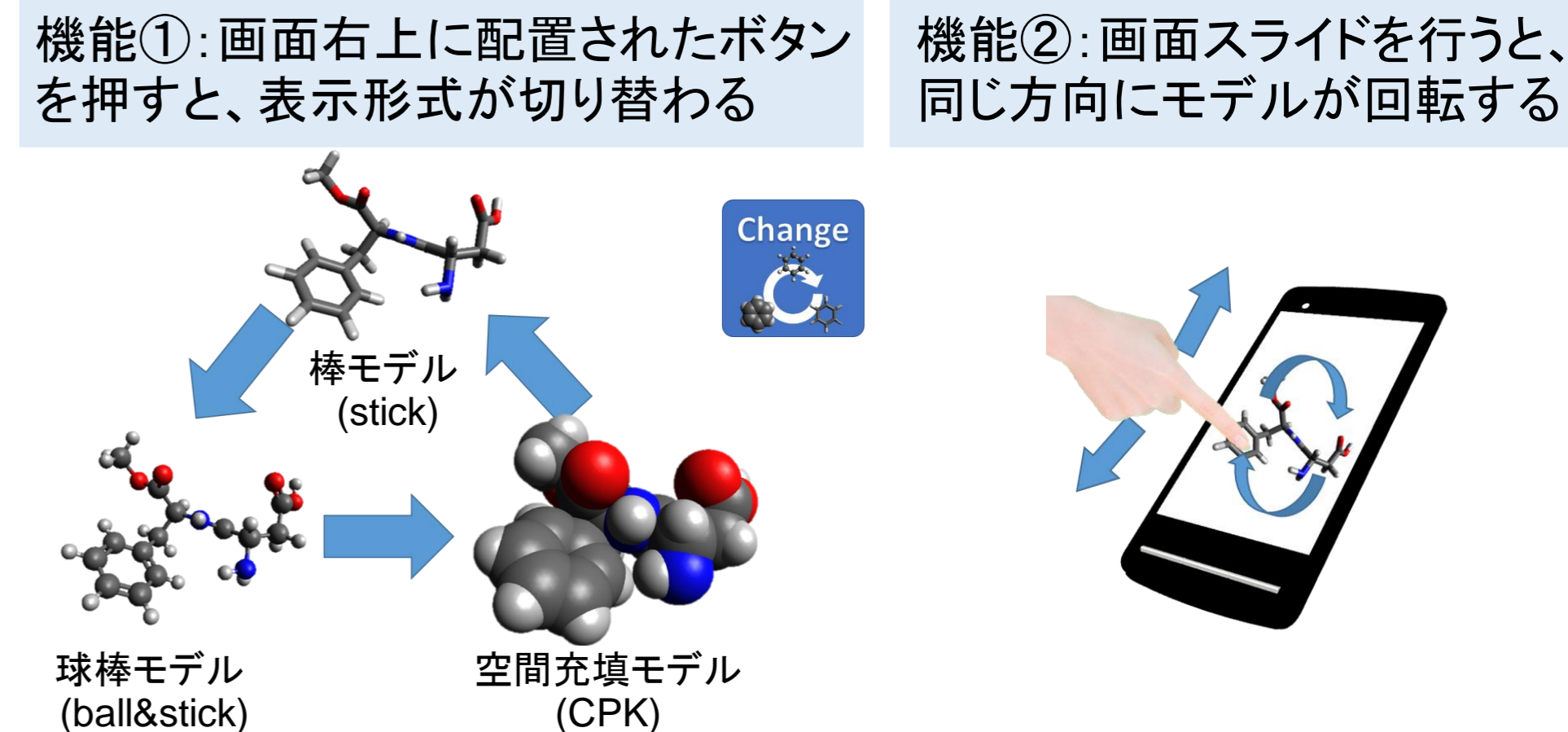
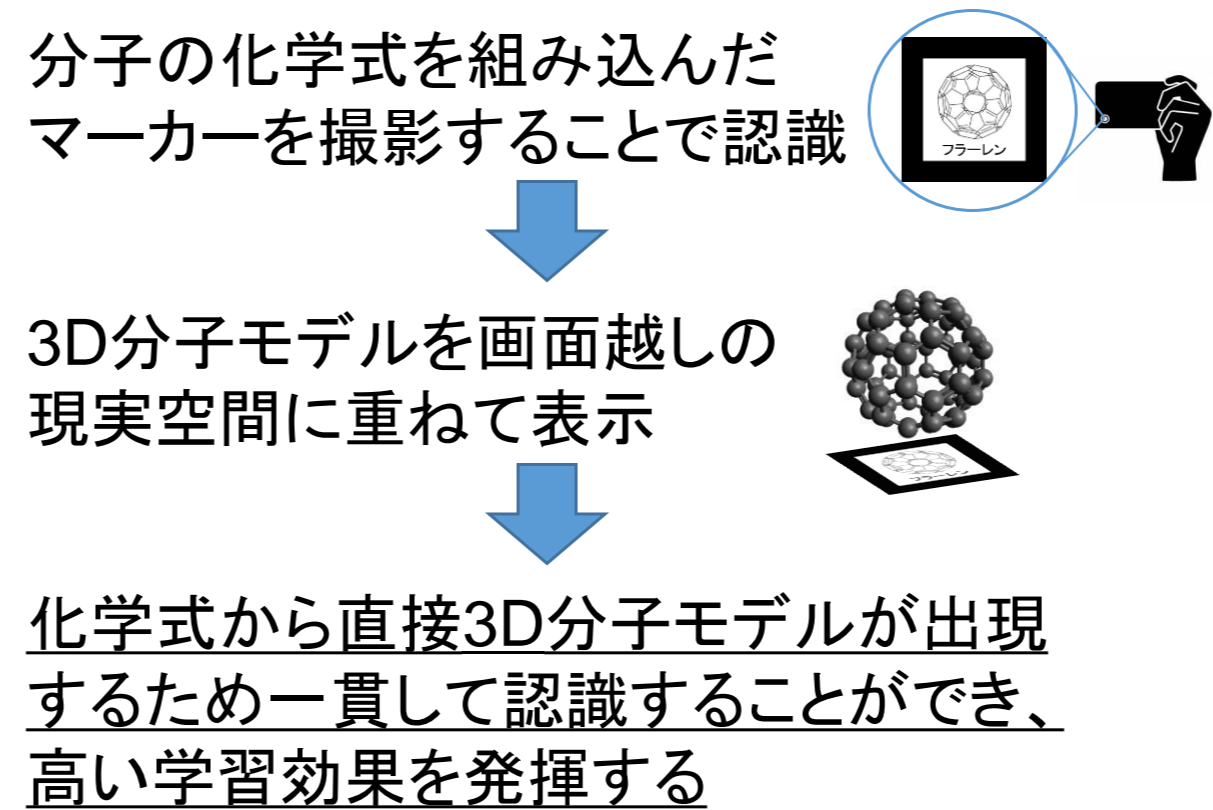
### Cambridge Crystallographic Data Centre

### 分子構造AR (Augmented Reality) 表示システム

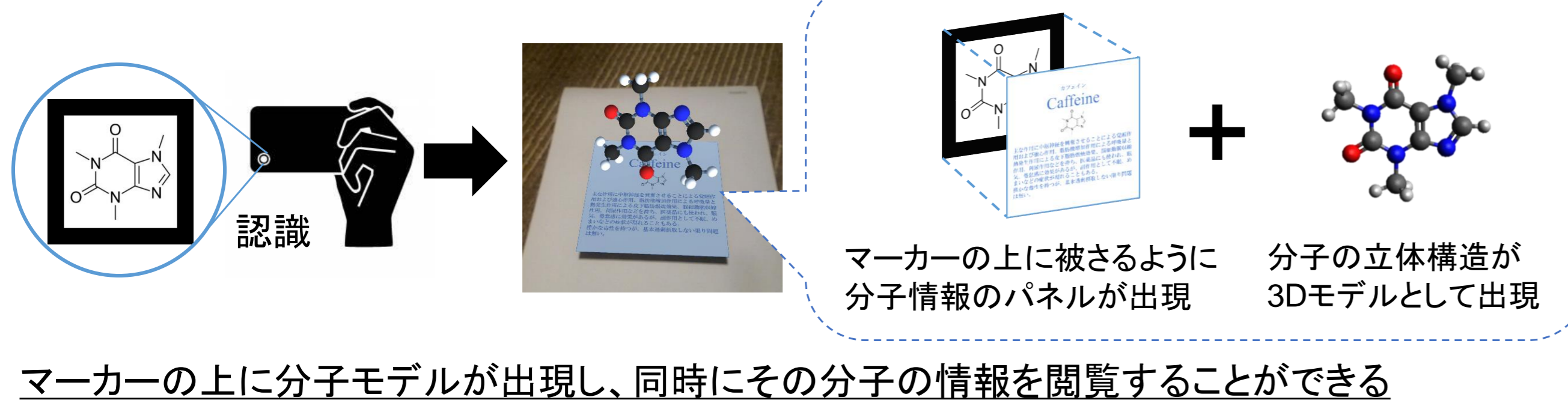


The Cambridge Structural Database (CSD) is the world's comprehensive and up-to-date database of fully validated crystal structures. The 2018 release contains over 900,000 entries – an increase of more than 60,000 entries!

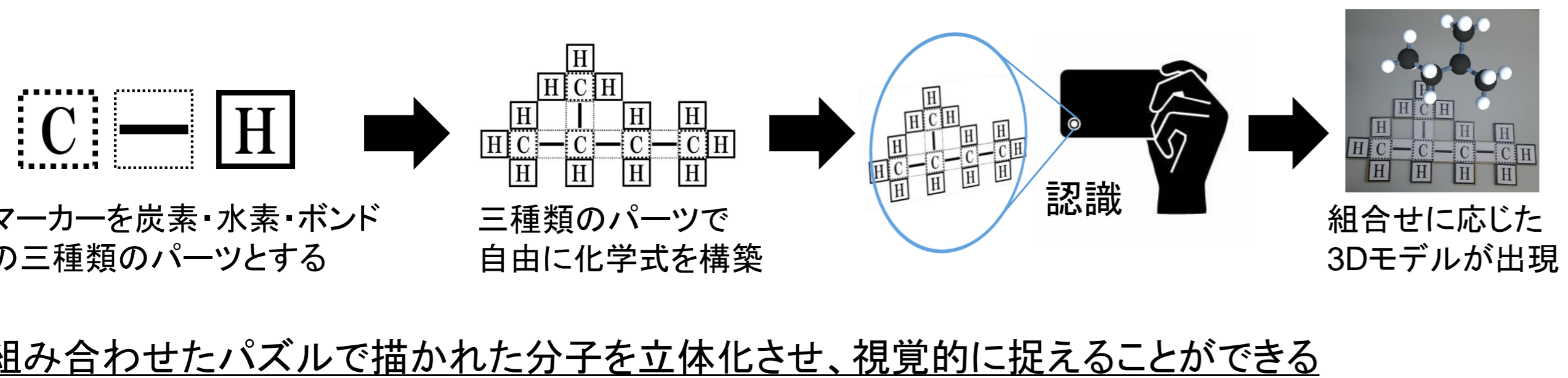
<https://www.ccdc.cam.ac.uk/>



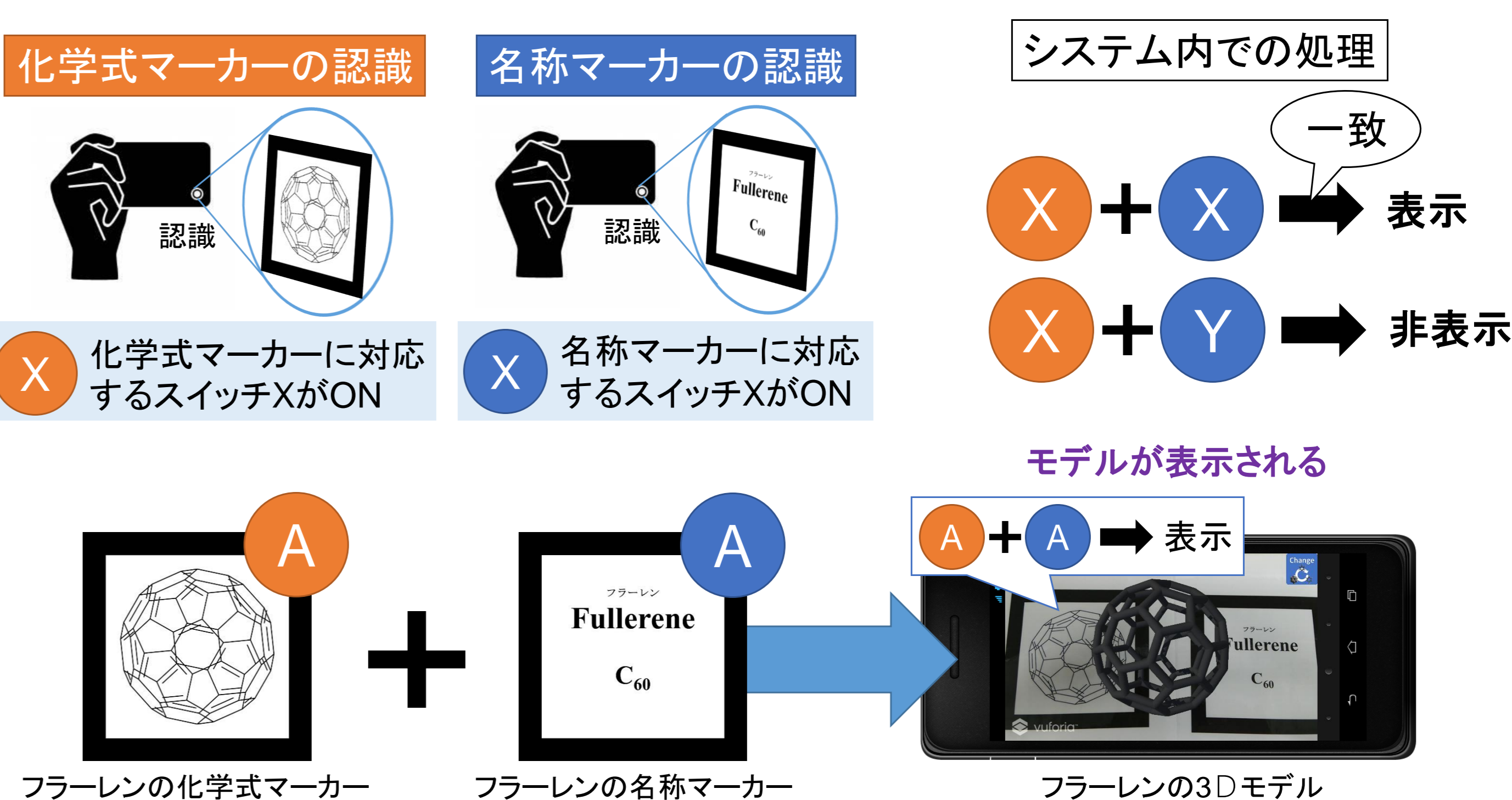
### ① ARマーカーを化学式としたシステム



### ② ARマーカーを化学式パズル化したシステム



### ③ ARマーカーを分離し「化学かるた」としたシステム



## ゲノム解析

### NCBI

(National Center for Biotechnology Information)

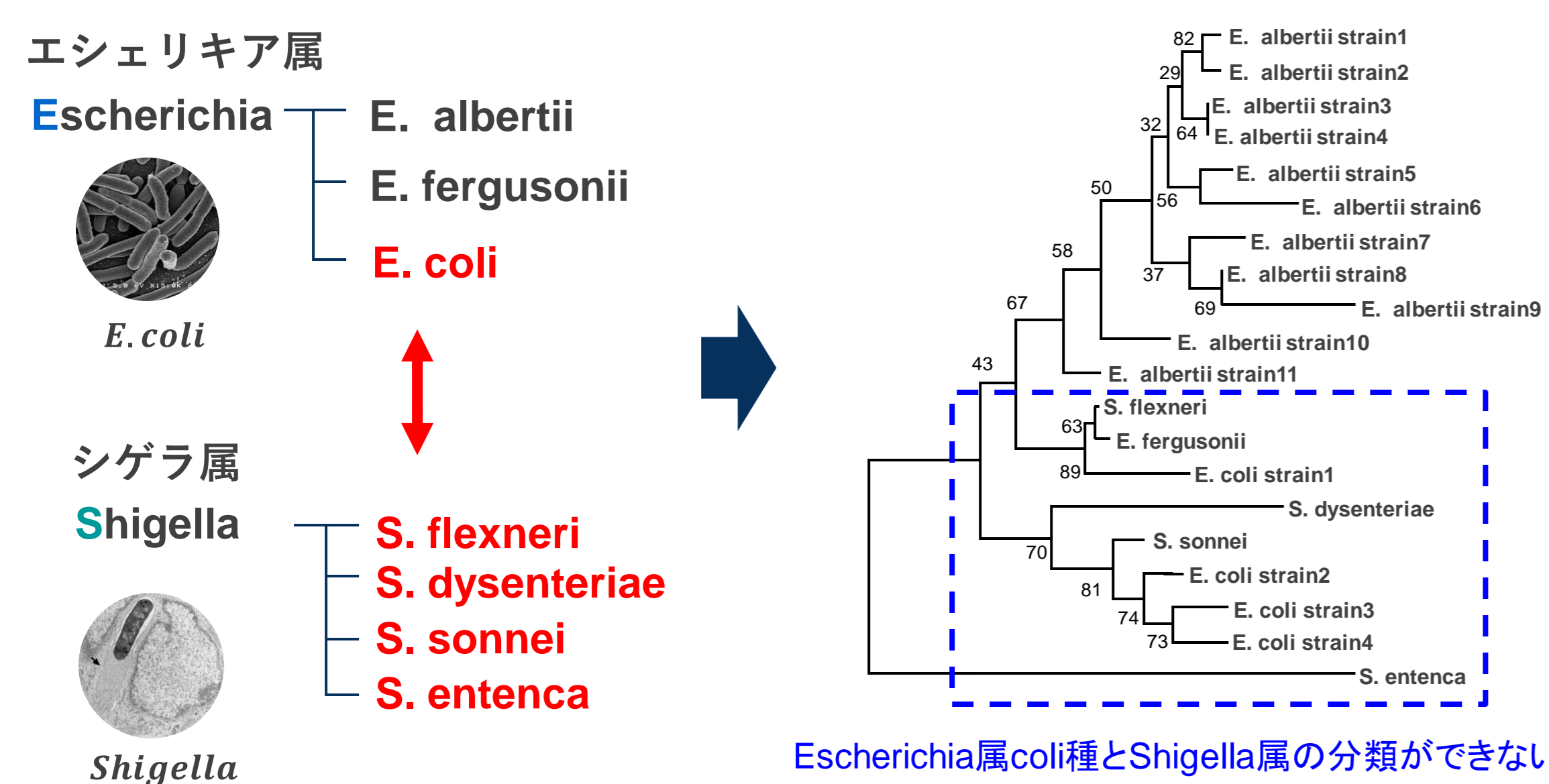


As a national resource for molecular biology information, NCBI's mission is to develop new information technologies to aid in the understanding of fundamental molecular and genetic processes that control health and disease. More specifically, the NCBI has been charged with creating automated systems for storing and analyzing knowledge about molecular biology, biochemistry, and genetics

<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/>

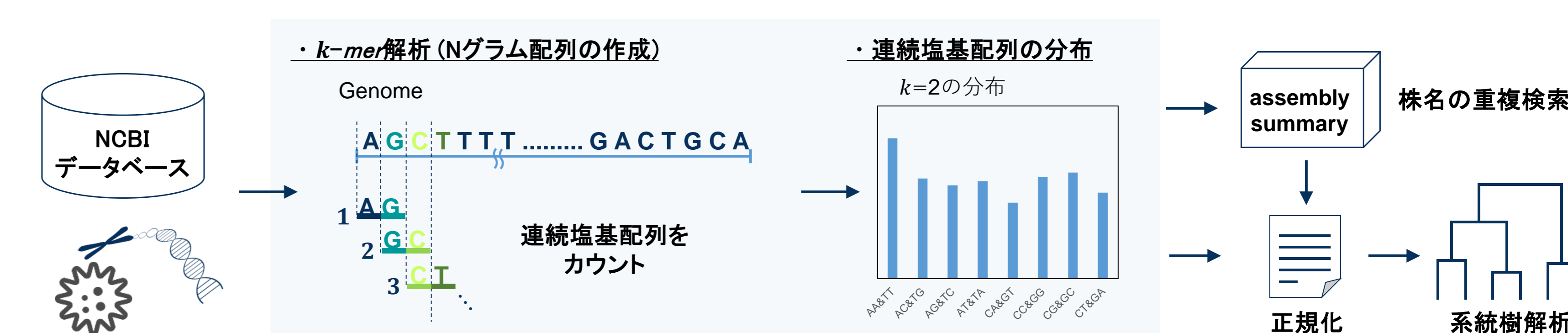
### 16S rRNA遺伝子による系統解析法の課題 ⇒ 近縁種のカテゴリ分けが難しい

### ■ バクテリアゲノムに対する16S rRNA塩基配列解析

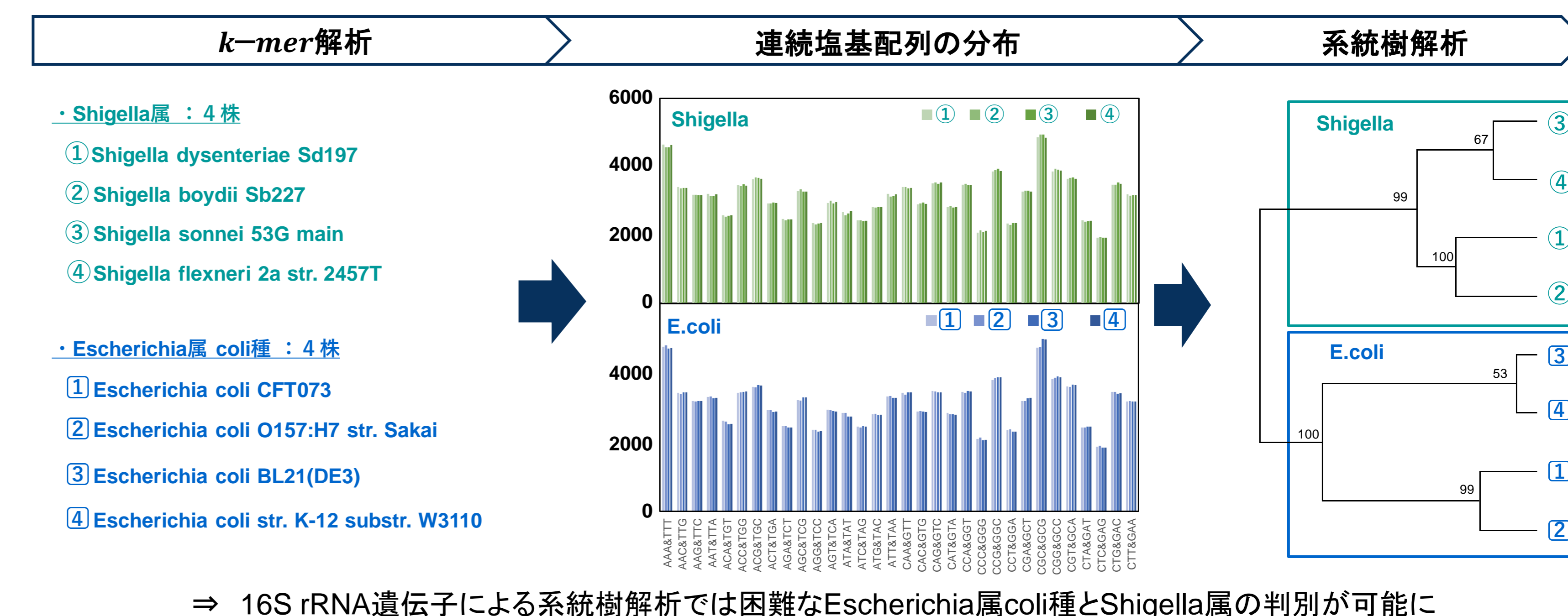


### 16S rRNA遺伝子に依存しない全ゲノム領域Nグラム配列に基づく細菌叢解析法の開発

#### ■ 解析プロトコルのフローチャート



#### ■ バクテリアゲノムに対する適用



⇒ 16S rRNA遺伝子による系統樹解析では困難なEscherichia属coli種とShigella属の判別が可能に