

# 蛋白質熱力学データベース ProTherm



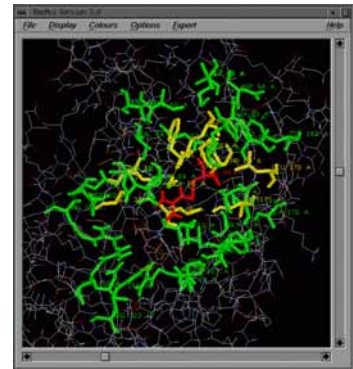
蛋白質や変異体の安定性に関する種々の熱力学量(変性温度、変性自由エネルギー、実験条件、実験方法、文献情報など)を文献から集めたデータベースで、すでに 15,000 件以上のデータを集録。ユニークなリソースとして世界中の研究者に利用されています。企業向けには、有償で最新のデータセットを提供します。また、アミノ酸変異による安定性変化を予測するツールも開発しており、安定な蛋白質のデザインなど工業的な応用にとっても有用です。

## ProTherm の特徴

- 17,000 件を超える蛋白質熱力学データ。
- 定期的なデータの更新により最新の情報が得られる(2、3ヶ月に一度は主要な更新)。
- 生体分子統合データベース 3DinSight により、配列、構造、機能、疾病などの情報と統合。
- 柔軟な検索インターフェイスにより高度な検索が可能。
- アミノ酸変異部位の可視化により、構造と安定性の関係が視覚的に把握できる。
- 主要なデータベースとのリンクにより、より多くの付加情報が得られる。

## ProTherm の内容

タンパク質と変異体の立体構造情報[タンパク質名と由来、変異位置とその二次構造、PDBコード等]、測定情報[条件、変性方法、測定法]、熱力学情報[転移温度( $T_m$ )、転移のエンタルピー( $\Delta H_{cal}$ ,  $\Delta H_{VH}$ )、転移の自由エネルギー変化( $\Delta G$ )、変異体と野生型の $T_m$ の差( $\Delta T_m$ )、 $\Delta G$ の差( $\Delta \Delta G$ )、転移の際の熱容量変化( $\Delta C_p$ )、変性剤名、変性中点濃度( $C_m$ )、 $\Delta G$ の変性剤濃度依存性( $m$ )、 $\Delta G$ の変性剤濃度ゼロへの外挿値( $\Delta G^{H_2O}$ )、変異体と野生型の $\Delta G^{H_2O}$ の差( $\Delta \Delta G^{H_2O}$ )、可逆性等]、機能情報、文献情報、関連データベースへのリンク[PDB (Protein Data Bank)、PMD (Protein Mutant Database)、EC (Enzyme Code)、PIR (Protein Information Resources)、SWISS-PROT (アミノ酸配列等情報)、3DinSight、PubMed (文献情報)]



蛋白質の変異部位の3次元構造表示(RasMol表示)

## 参考文献

K.A. Bava, M.M. Gromiha, H. Uedaira, K. Kitajima and A. Sarai "ProTherm, version 4.0: Thermodynamic Database for Proteins and Mutants" *Nucleic Acids Res.* 32, D120-D121 (2004).

上平初穂, M.Michael Gromiha, 安江虹, 皿井明倫: "タンパク質と変異体の熱力学データベース" 熱測定 27, 250-256 (2000).



九州工業大学 情報工学部 生命情報工学科

〒820-8502 福岡県飯塚市川津 680-4

Tel: 0948-29-7811, Fax: 0948-29-7841, E-mail: sarai@bse.kyutech.ac.jp

<http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/Protherm/protherm.html>

