

2005.9.20

千葉大学学術成果リポジトリ (CURATOR) 公開記念シンポジウム

大学における学術情報基盤とリポジトリ ---研究成果発信の立場から---

千葉大学大学院薬学研究院
星野忠次

リポジトリに期待すること

1. 研究効率の向上
2. 情報発信の信頼性
3. 広告・宣伝

研究効率の向上

千葉大学蔵書検索
(OPAC)

電子ジャーナルAtoZ

全国大学図書館蔵書検索
Webcat



インターネット
検索



文献が取れない！
購読契約していない。

文献の入手
情報の獲得

研究効率の向上

出版社、雑誌社

論文出版費

雑誌購読料

研究者

大学、研究機関

研究効率の向上

研究者 大学、研究機関



出版社、雑誌社

情報発信の信頼性

図書館のメリット(個人に比べて)

- ・データの保守性が高い
- ・サーバーの管理が良い
- ・公共性がある

→ データ情報の重み

論文

Reference

- 1) Mori & Hoshino, *Chem-Bio Inform. J.* **4**, 15-26 (2004).
 - 2) Ode, H., Ota, et. al., *J. Phys. Chem. B* **109**, 564-574 (2005).
 - 3) http://mitizane.ll.chibau.jp/curator/~presentation/p/hoshino/2005_8_24
- ・
- ・

Molecular Dynamics Simulations of HIV-1 Proteases

Application of molecular calculation to the choice of drugs for individuals

| | |
|------------------|--|
| H.Ode | Grad. School Pham. Sci., Chiba Univ. |
| M.Hata | Grad. School Pham. Sci., Chiba Univ. |
| S.Neya | Grad. School Pham. Sci., Chiba Univ. |
| W.Sugiura | National Inst. Infection Diseases |
| T.Hoshino | Grad. School Pham. Sci., Chiba Univ. PREST, JST |

情報発信の信頼性

arXiv.org e-Print archive



Cornell University
Library

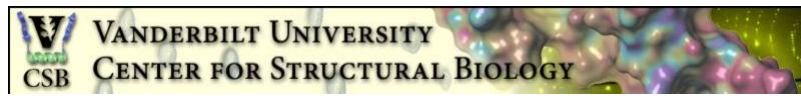
arXiv is an e-print service in the fields of physics, mathematics, non-linear science, computer science, and quantitative biology. The contents of arXiv conform to Cornell University academic standards. arXiv is owned, operated and funded by Cornell University, a private not-for-profit educational institution. arXiv is also partially funded by the National Science Foundation.

物理、数学、非線形科学、計算機科学、量生物学

情報発信の信頼性

Assisted Model Building with Energy Refinement

<http://amber.scripps.edu/>



AMBER Mail Reflector Archive

<http://structbio.vanderbilt.edu/archives/amber-archive/>

広告・宣伝

- ・研究成果を学内外にアピール
- ・研究成果へのリンク
- ・一般からの評価

広告・宣伝

[Theoretical and Computational Biophysics Group](#)

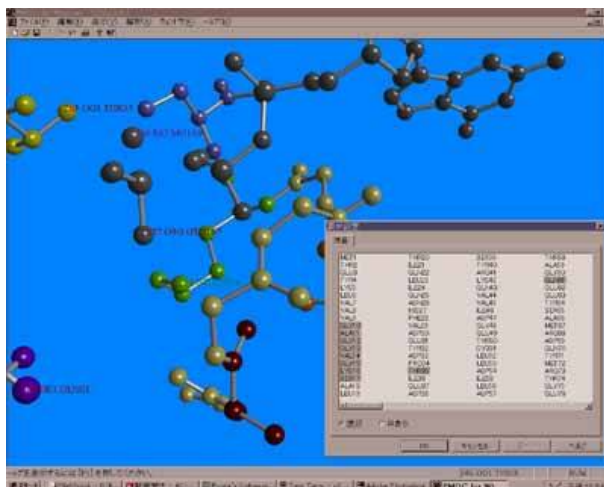
NAMD
Scalable Molecular Dynamics

[NIH Resource for Macromolecular Modeling and Bioinformatics](#)

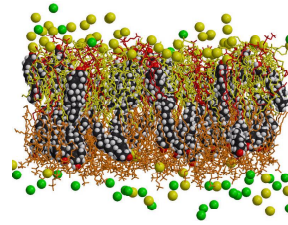
<http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>

広告・宣伝

fxmol (<http://www.futatsugi.net/develop/soft/fxmol.html>)

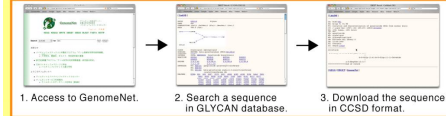


広告・宣伝



Modeling of glycans (Glycan Modeling Tool: GMT)

1. Get a sequence of a glycan (CCSD format)



2. Processing in "GMT" (written in Tcl/Tk)

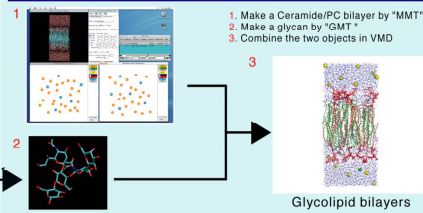
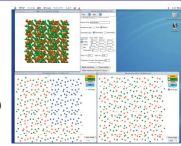
1. Read the sequence
b-D-Galp-(1-3)-b-D-GalpNAc-(1-4)+
b-D-Galp-(1-4)-b-D-Glcp-(1-1)-Ceramide
a-D-Neup5Ac-(2-3)+
2. Convert the sequence into lists of strings
 Segment 1: "(b)-(D)-(GAL)-(1-3)-(b)-(D)-(GALNAc)-(1-4)+"
 Segment 2: "(b)-(D)-(GAL)-(1-4)-(b)-(D)-(GLC)"
 Segment 3: "+"
 Branch Position: 33
 (a)-(D)-(NEU)-(2-3)+
3. Construct each segment
3. Combine all the segments, and Display the structure with VMD



Modeling of glycolipid bilayers (GMT & MMT)

MMT (Membrane Modeling Tools) (VMD plugin developed in our lab)

- Features
1. Only "1 Click" to make a membrane.
 2. Each lipid can be mutated to other lipids (Ex. POPE to DPPC, DPPC, DPPS, POPE, POPS, SM, Cholesterol)
 3. You can define the size of the membrane, and the ratio of each lipid molecule.



研究者の責務

1. 研究評価
 2. 成果発信
- の多様化