

課題名 (タイトル) :

構造未決定蛋白質の *ab initio* 構造予測

利用者氏名 : 竹嶋 伸之輔

所属 : 和光研究所 基幹研究所 分子ウイルス学特別研究ユニット

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

蛋白質の 3 次元立体構造は、創薬などにおいて非常に重要な情報である。しかしながら、実験的に明らかになっている蛋白質の構造はまだ少数で有り、いまだ構造の明らかでない、生体に重要な働きを及ぼす蛋白質は数多く存在する。近年、アミノ酸配列情報とこれまでに明らかになっている立体構造情報から、新規に蛋白質の構造を *in silico* により明らかにする技術が急速に発展してきている。本研究では、これらの技術を用いて、未だ構造の明らかとなっていないインフルエンザ蛋白質およびレトロウイルスの Tax 蛋白質の立体構造を予測することを目的としている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

I-TASSER, ROSETTA 等の *ab initio* での構造予測プログラムを用いた構造予測、および COSGENE 等による蛋白質-低分子化合物の MD による結合評価などを行った。

3. 結果

インフルエンザ NP 蛋白質の構造を予測し、既に結合が確かめられている化合物との結合を評価を行った。現在のところ、結合する証拠は得られていない。

Tax 蛋白質については ROSETTA により構造予測を行った。前半部分に関しては、一定の構造が得られたが、Tax の活性に深く関わりと実験的に確かめられている後半部分の構造は信頼性が低く、更なる工夫が必要であると考えられた。

4. まとめ

構造が解かれていない蛋白質として、インフルエンザ NP 蛋白質、および BLV-Tax 蛋白質の構造予測を行った。現在のところ、実験結果をサポート

する結果は得られておらず、更なる検討が必要である。

5. 今後の計画・展望

*in vitro* による蛋白質の結合情報や変異情報を蓄積し、再度構造の検証を行いたい。