

タンパク質立体構造情報を利用した機能予測法 FCANAL : 酵素・結合タンパク質への応用

鈴木歩¹ 安藤格士¹ 山登一郎^{1*} 宮崎智²

¹東京理科大学 基礎工学研究科 生物工学専攻

〒278-8510 千葉県野田市山崎2641

²東京理科大学 薬学部 薬学科

〒278-8510 千葉県野田市山崎2641

*E-mail: iyamato@rs.noda.tus.ac.jp

要旨

構造ゲノムプロジェクトの進展によってタンパク質立体構造情報の蓄積は膨大な量になり、機能未知の立体構造も増加してきている。タンパク質の機能を予測する手法として配列相同性検索が一般的であるが、機能既知の遺伝子との相同性が見られない配列が多数存在することから、この手法には限界があると考えられている。そこで配列よりも機能部位における保存性が高く、機能と密接に関わっているタンパク質立体構造情報を利用した機能予測法が注目されてきている。これを受けて、私達は立体構造情報を利用した高速・高精度な機能予測法 FCANAL の開発を行ってきた。本手法では機能部位とそれ以外の部位のアミノ酸残基の C α 原子間の距離と、その出現頻度を比較することによってスコア行列を作成し、機能予測に用いている。前回の報告では、スコア行列の作成にモチーフ配列を必要としたが、本報告では配列類似性の低いタンパク質に対しても適用できるように発展させた。31 種の酵素タンパク質を対象として作成したスコア行列を用いて、Protein Data Bank に登録されているすべてのタンパク質立体構造に対して FCANAL を実行したところ、高い精度で機能部位を予測することができた。今後、構造データベースの拡充とともに、機能未知のタンパク質立体構造が増えることにより、本手法の有用性はさらに高まるものと考ええる。

キーワード：タンパク質機能予測、酵素タンパク質、結合タンパク質、タンパク質局所立体構造、アミノ酸使用傾向、距離分布、バイオインフォマティクス

領域区分：分子生物学における情報計算技術