

Tertiary structure prediction of RNA-RNA interacting structure using short fragment structures and secondary structure information

山崎 智

情報基盤統合チーム, CBRC, AIST

タンパク質へと翻訳されることなく、それ自身が他分子との相互作用を通じて翻訳調節などの機能に関わる RNA 分子、機能性 RNA の重要性が増す中で、その二次構造、更に近年では三次構造を計算機で予測する手法の研究が盛んに行われている。その成果もあって、十数～数十塩基程度の単純な小分子 RNA であれば、十分な精度で、かつ短時間のうちにその二次・三次構造を予測出来る手法が得られるようになって来ている。

その一方で、RNA-RNA 間の相互作用予測についての状況は異なる。二次構造レベルでの RNA-RNA 相互作用予測は近年いくつかの手法が成功を収めている。三次構造レベルで相互作用予測と言えば一般的には単体構造同士の Docking 手法が有効であると言えるが、RNA-RNA の場合は RNA の高い柔軟性がその障害となりうる。始めから RNA 複合体として予測が出来ればその障害をクリアできる。本研究では、D.Baker らの開発したフラグメント・アセンブリ法をベースに、単体・複合体を問わず与えられた二次構造情報を適切に再現した三次構造を予測する手法を開発した。二本鎖らせん構造や kissing-loop 構造など RNA-RNA 相互作用に頻繁に見られる構造について、開発手法を用いた予測結果を紹介する。