

機能解析のためのタンパク質基質結合可能部位の網羅的比較解析

富井 健太郎

細胞システム解析チーム, チーム長, CBRC, AIST

細胞内に存在し、その機能や動態などを制御する多種多様なタンパク質は、低分子化合物などとの結合を介して、その機能を発現することも多い。これまでに我々が開発したタンパク質局所構造比較手法は、構成アミノ酸の物理化学的及び幾何学的性質に基づく基質結合(候補)部位の粗視化(ビット列への変換)と複合ソート法の適用により、従来比較手法よりも 1000 倍以上の高速化を実現し、PDB 中の数百万にのぼる基質結合(候補)部位から類似部位ペアを網羅的に列挙することを可能とした。本手法を、300 万を越える既知及び潜在的な基質結合部位の比較に適用し、スーパーファミリーやフォールド分類にかかわらず、タンパク質間で共通する機能部位の抽出に成功した。また、構造ゲノムプロジェクトなどにより決定された機能未知タンパク質の基質及びその結合候補部位の推定にも成功している。現在、こうした比較解析の結果をまとめたデータベース PoSSuM (<http://possum.cbrc.jp/PoSSuM>)を構築し、幅広い分野の研究者に情報を提供している。

参考文献

- 1) J. Ito *et al.*, (2012) *Proteins* **80**(3), 747-763.
- 2) J. Ito *et al.*, (2012) *Nucleic Acid Res.* **40**, D541-D54.
- 3) Y. Tabei and K. Tsuda, (2011) *Molecular Informatics* **30**(9), 801-807.