

テーマ1- 3- 1

CG技法によるDNA結合タンパク質の結合能評価ツールの開発

(株) パイケーク

木寺重樹

横浜市立大学大学院国際総合科学研究科

西村善文

【目的】

数多くのDNA結合タンパク質の立体構造が解明されるに従い、DNAに結合しているタンパク質に見られる特異的な表面（正電荷を帯びた領域）はDNAの外側に形成される負電荷の認識に使われていることが判ってきた。

本研究開発では、DNA結合タンパク質に見られるこの特異な表面を定量化することで任意のタンパク質においてもDNAへの結合能（結合親和性）が評価できる方法を開発する。

【進捗状況】

これまでに、分子モデルを考察する上で必要となるPDB（Protein Data Bank）データの「立体的な可視化機能」および「DNAの内側から眺めて認識部位の様子を画像化するパノラマ展開表示機能」を開発した。

また、DNA結合タンパク質の結合能を定量的に理解するために、タンパク質がリン酸骨格を認識する際に影響を受けていると思われる荷電分子間の位置関係について算出する機能を開発した。そして、この機能を使って既存のPDBについて比較検討を行った。更に算出結果と一っしょにその内容を図式化する開発も行っている。

【まとめ】

本研究で開発したツール（ソフトウェア）を使って、リン酸骨格に沿ったDNA結合タンパク質の表面の様子（結合能）が数値化できるようになった。これは簡易的な数値化方法であるが、サンプルにしたPDBの値は全て正（引き合う力）を示し、確かにDNA結合タンパク質がDNAのリン酸骨格を認識していることと一致した。

【今後の予定】

ツールの完成度を上げ、研究者の方に使って頂けるレベルに仕上げる。