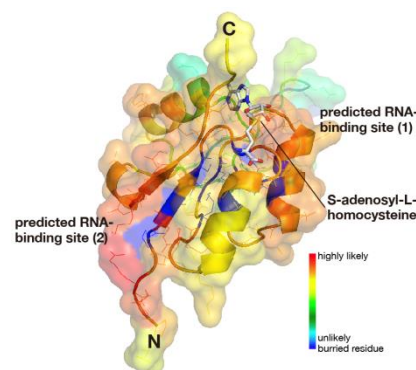


ホモロジーモデリングによる タンパク質構造解析の支援

[技術の概要]

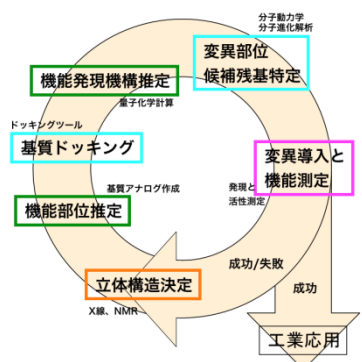
・研究対象としているタンパク質の 機能部位(残基)を推定します。

ターゲットタンパク質を点変異で機能しなくすること、あるいは機能を低下させることは、そのタンパク質を含むシステム全体の機能を理解する上で不可欠です。アミノ酸配列から立体構造をモデリングし、機能部位(特に核酸との相互作用部位)を推定することで、タンパク質の構造を維持したまま、機能を欠損させるためにはどの部位に変異を入れるのがよいかを提案できます。



・酵素の機能を向上するための 変異部位(残基)を提案します。

研究対象としている酵素の機能を向上することによって、バイオ薬品の収率を上げることなどが考えられます。アミノ酸配列から立体構造をモデリングし、分子動力学計算結果と進化情報を融合することで、どの部位にどのような変異を導入するすれば、機能(収率)を向上できるかを提案します。



[技術の利用例]

技術の適用成果の多くは、論文(共同研究)として発表してきました。

遺伝子変異病態予測支援: Terui, H., et al. (2013)

Journal of Biomedical Science, **20**, 25.

ホモロジーモデリング支援: Hoshina, S., et al. (2013)

Journal of Biological Chemistry, **288**(42), 30161-300171.

ホモロジーモデリング支援: Yoshida, M., et al. (2014)

Scientific Reports **4**, 4256.

機能部位予測支援: Kato, Y.S., et al. (2014) *Structure*,

22(11), 1628-1638.

低分子複合体構造支援: Hori-Tanaka, et al. (2015)

Steroids, **96**, 81-88.

連絡先

[所属] お茶の水女子大学
生命情報学教育研究センター

[名前] 近藤るみ、由良 敬

[E-mail] yura.kei@ocha.ac.jp