

様式 C-7-1

平成 19 年度科学研究費補助金実績報告書（研究実績報告書）

1. 機関番号 1 4 6 0 3 学 2. 研究機関名 奈良先端科学技術大学院大
3. 研究種目名 基盤研究 (C) 4. 研究期間 平成 19 年度 ~ 平成 20 年度
5. 課題番号 1 9 5 0 0 2 5 3
6. 研究課題名 分子間相互作用予測を目指したタンパク質複合体結合部位の幾何形状解析

7. 研究代表者

研究者番号	研究代表者名	所属部局名	職名
6 0 3 4 3 2 7 4	カワバタ, タケン 川端, 猛	情報科学研究科	准教授

8. 研究分担者(所属研究機関名については、研究代表者の所属研究機関と異なる場合のみ記入すること。)

研究者番号	研究分担者名	所属研究機関名・部局名	職名
	フリガナ		
	フリガナ		
	フリガナ		
	フリガナ		
	フリガナ		

9. 研究実績の概要(国立情報学研究所でデータベース化するため、600字~800字で記入。図、グラフ等は記載しないこと。)

下欄には、当該年度に実施した研究の成果について、その具体的内容、意義、重要性等を、交付申請書に記載した「研究の目的」、「研究実施計画」に照らし、600字~800字で、できるだけ分かりやすく記述すること。また、国立情報学研究所でデータベース化するため、図、グラフ等は記載しないこと。

本研究では単量体の蛋白質構造からの結合分子の種類や結合力、結合部位の推定を最終目標とする。本年度は、開発を進めているモルフォロジーを利用したポケット認識プログラム **ghecom** を用いて、以下の三つの研究を行った。(1) ポケット部に結合する分子を予測するため、同一分子が結合する既知結合部位のタンパク質の原子配置がどの程度類似しているか、調査を行った。PLP, FAD, ADP について調査したところ、進化的に関係のない別のスーパーファミリーに属するタンパク質では、類似性が高くはないが、最近接原子のみに注目すると、ランダムレベルに比べ有意に類似していることがわかった。この成果は日本蛋白質科学会年会において発表した。(2) ポケット部の機能的重要性を調べるため、病因性の nsSNP に注目し、中立な nsSNP のサイトと、ポケットの深さに違いがあるかどうか調べた。病因性のサイトはより深いポケット部に多いことがわかった。配列保存度や溶媒露出度など他の特徴量と組み合わせることで、より高精度に病因性のサイトを識別できることがわかった。この成果は日本生物物理学会にて発表した。(3) これまで、ポケットの定義をメチル基の大きさのプローブ球が進入できる空間に限定していたが、より現実の分子に近づくよう、ベンゼン、アデニンなど非球状の任意形状のプローブに対応できるようなアルゴリズムを拡張した。これにより、計算時間は増大するが、特にヘム結合部位の結合部位予測の性能向上が見られた。

※ 成果の公表を見合わせる必要がある場合は、その理由及び差し控え期間等を記入した調査(A4判縦長横書1枚)を添付すること。

10. キーワード

- (1) バイオインフォマティクス (2) 構造バイオインフォマティクス (3) タンパク質  
 (4) 分子認識 (5) 分子形状 (6) モルフォロジー  
 (7) (8) (裏面に続く)

11.研究発表（平成19年度の研究成果）

〔雑誌論文〕 計（ 0 ）件

著者名	論文標題			
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁
			■ ■ ■	

著者名	論文標題			
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁
			■ ■ ■	

著者名	論文標題			
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁
			■ ■ ■	

〔学会発表〕 計（ 2 ）件

発表者名	発表標題		
渡邊潤也、川端 猛	非相同な蛋白質の同一リガンド結合部位における原子配置の類似性解析		
学会等名	発表年月日	発表場所	
第7回日本蛋白質科学会年会	2007年5月24日	東北大学	

発表者名	発表標題		
吉井悠喜、川端 猛	変異サイトの溶媒露出度、ポケット度、アミノ酸頻度等に基づいたnsSNPsの表現型に与える影響の予測		
学会等名	発表年月日	発表場所	
日本生物物理学会第45回年会	2007年12月21日	パシフィコ横浜	

〔図書〕 計（ 0 ）件

著者名	出版社		
書名	発行年	総ページ数	
	■ ■ ■		

12. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

〔出願〕 計（ 0 ）件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	出願年月日	国内・外国の別

〔取得〕 計（ 0 ）件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	取得年月日	国内・外国の別

13. 備考

※ 研究者又は所属研究機関が作成した研究内容又は研究成果に関するwebページがある場合は、URLを記載すること。

--