

29【P1】 I -136

抗 HIV タンパク質アクチノヒピンと糖鎖の相互作用解析

○黒崎 聖英¹, 山乙 教之¹, 高橋 淳¹, 猪腰 淳嗣¹, 田中 晴雄¹, 大村 智², 広野 修一¹(¹北里大薬,²北里大生命研)

【目的】アクチノヒピン (AH) は、放線菌由来の 114 アミノ酸残基からなるタンパク質で、HIV の gp120 に結合して抗 HIV 活性を示すことが報告されている。しかしながら、AH の 3 次元構造や gp120 との結合様式等は明らかにされていない。そこで我々は、ブラウン動力学 (bd) シミュレーションを用い、AH の水溶液中での立体構造解析を行った。また、その構造を用いて糖鎖とのドッキングシミュレーションを行い、その結合様式について検討した。

【方法】分子モデリングソフト FAMS (北里大学梅山研) を用いて、Xylanase (PDB ID: 1xyf) を鋳型としてホモロジーモデリングを行う。次に、このモデリング構造を精密化するために、bd シミュレーションを行う。さらにここで得られた bd トラジェクトリーに対して、ドッキングプログラム FlexX [SYBYL6.9 Tripos Inc.]を用いて mannobiose との複合体の構造構築を行う。

【結果】現在 AH のホモロジーモデリングを終了し、bd シミュレーションによりモデル構造の精密化を行っている。水溶液中での 3 次元構造および糖鎖とのドッキングの結果については当日報告する。