

# 26LA-am09

新規な蛋白質サブユニット間空間体積の計算法

○前田 美紀<sup>1</sup>(<sup>1</sup>独)生物研)

【目的】空間に合致した形状の分子をデザインする場合、その空間の体積は重要な情報である。しかし空間体積を計算する方法は意外に少ない。特に蛋白質サブユニット間の体積を計算する方法は SURFNET による gap volume 以外には知られていない。SURFNET ではサブユニット間に球を充填できる空間を検出するため、相互作用していない領域も体積として含むという問題があった。そこで、サブユニット間の相互作用領域のみの空間体積を計算する方法を開発した。

【方法】2つのサブユニット表面の相互作用領域を溶媒接触表面積の差で検出する。この相互作用領域に含まれる原子の座標からドロネー分割によって会合領域を定義する。定義された会合領域のうち、原子内部にある空間を除外することでサブユニット間の空隙の体積を計算する。

【結果と考察】この方法で計算される会合空間体積(ASV)の値を gap volume の値と比較したところ、テストしたホモ二量体構造の大部分で gap volume 値は ASV 値より大きくなる傾向が見られた。gap volume 値が ASV 値よりはるかに大きくなる例(1PRE)では、gap volume で検出される空間の一部としてコンタクトのない大きい空間が含まれ、また比較的値が近い例(1AMK)でも検出される部位は異なることが判った。これらの結果より、2つのサブユニットが相互作用する領域を解析する目的において、ASV は gap volume よりも適していると考えられる。

1AMK



ASV = 1857 Å<sup>3</sup>



gap volume = 2603 Å<sup>3</sup>

1PRE



ASV = 4252 Å<sup>3</sup>



gap volume = 21360 Å<sup>3</sup>