

29pmA-086

タンパク-リガンド相互作用に関わる芳香性クラスターの探索

○山崎 広之¹, 西端 芳彦¹(¹北里大薬)

芳香性残基は、タンパク質構造の主要な構成要素の一つであり、構造安定性や折りたたみ、タンパク質-タンパク質認識、リガンド結合に重要であることが示されている。芳香性残基間の相互作用はタンパク質構造において幅広く研究されており、Adrianらは、三個や四個の残基など二個以上の残基からなる芳香性クラスターの調査およびその特徴づけを行った。その結果、タンパク質に存在する残基の中には二個以上の大きなクラスターを形成し、タンパク質機能、安定性、リガンド認識に関連していることが示された。我々は創薬において関心が高いのはタンパク質内部の相互作用ではなく、タンパク質とそのリガンドを含めた相互作用であると考えた。そこで、Adrianらの手法がタンパク-リガンド間でも適用できないかと考えて手法の拡張を試みた。Adrianらの手法を拡張した手法を、タンパク質情報とそのリガンド情報を保存している PDBbind-CN データベース中のデータに対して適応したところ、タンパク質構造と同様に、タンパク質とそのリガンドの間で三個や四個の芳香環がクラスターを形成しているのを確認することができた。さらに芳香性クラスターの特徴づけを行い、詳細を発表する。

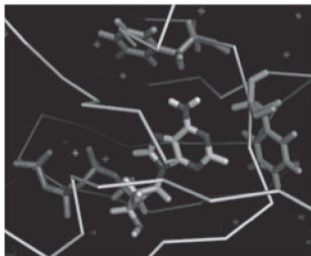


Fig. 1 三個の芳香環によるクラスターの一例