

# テーマ タンパク質と核酸の相互作用モデル

適用分野 プロテオーム（タンパク質）解析、新規薬剤の設計



研究名称 生体分子間相互作用のモデル化と局所的相互作用の定量化

氏名 川上純司 教授  
所属 フロンティアサイエンス学部 生命化学科

## 内容

### ●特徴

生命活動の基本を担う生体高分子であるタンパク質と核酸（DNA, RNA）との相互作用は、水素結合や芳香環同士のスタッキング、疎水性相互作用、静電気相互作用など、複雑な多くの結合を含んでいる。これら局所的相互作用の効果を明らかにするために、特定の相互作用のみを欠損させ、結合エネルギーの損失を定量化することが目的である。この目的が達成されれば、相互作用の全体像を造り上げる仕組みを解明するのみならず、変異体タンパク質や新規薬剤の結合活性を正確に予測する手法が開発できると期待できる。

### ●研究内容

タンパク質（アミノ酸が決まった順番で多数つながっている）とRNA（ヌクレオチドが決まった順番でつながっている）の結合は、アミノ酸やヌクレオチドの構造中に含まれている様々な官能基同士の相互作用を組み合わせ実現する。具体例として、細菌に感染するウイルス（バクテリオファージ）に見られるタンパク質が、RNAに結合する反応をモデル化し、官能基レベルでの局所的相互作用のエネルギーを定量化し、データベースに蓄積している。

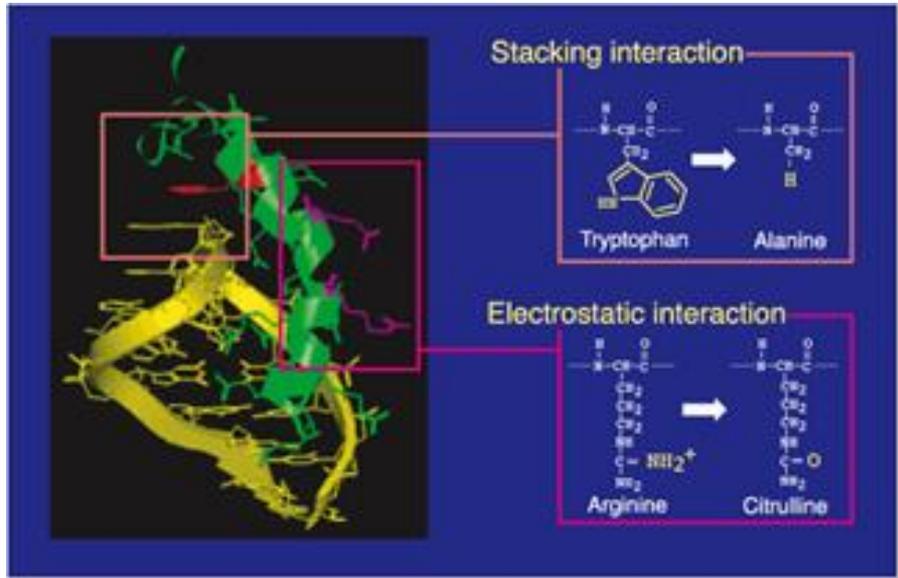


図 タンパク質によるRNA認識モデル

キーワード タンパク質-核酸相互作用モデル、局所的相互作用エネルギー、安定性予測、薬剤設計、定量化、スタッキング相互作用、水素結合、静電的相互作用

- 連携方法 ■ 講演 ■ 研修 ■ 研究相談 ■ 学術調査 ■ コメント ■ 共同研究