

タンパク質立体構造情報の利用によるタンパク質-基質間相互作用予測



講師

富井 健太郎 先生

人工知能研究センター 上級主任研究員

日付：2025 年 7 月 18 日（金）

時間：16時35分～18時05分

場所：E201 教室

講演概要

生体分子構造決定技術の進歩に伴い、タンパク質-基質複合体についての構造情報の蓄積が進んでいる。われわれは、Protein Data Bank (PDB) に蓄積された立体構造情報を活用した基質結合部位の予測に向け、既知および未知の基質結合部位の類似性に関する検索結果をまとめたデータベース PoSSuMを構築し、公開している

(<https://possum.cbrc.pj.aist.go.jp/PoSSuM/>)。また、オフターゲット予測や既存薬のリポジショニングなどへの応用を目指し、承認された経口薬の既知の結合部位やPoSSuMに含まれる類似の未知の結合部位を含む PoSSuMdsデータベース

(https://possum.cbrc.pj.aist.go.jp/PoSSuM/drug_search/)を構築している。さらに近年、PoSSuMデータセットとその構築法に基づき、AlphaFoldによるヒトタンパク質の予測構造モデルに含まれる基質結合(候補)部位の類似性検索結果を含む

PoSSuMAF(<https://possum.cbrc.pj.aist.go.jp/PoSSuMAF/>)データベースを開発した。本発表では、これらデータベースの概要と、それらの利用例などを紹介する。

問い合わせ先

伊藤和義：kazuyoshi@soka.ac.jp

研究所HP：<https://www.soka.ac.jp/glycan/>

