1. 序論

1.1 研究背景

グラフィカル ユーザー インターフェイス, アプリケーション

自動的に生成された説明近年、タンパク質には、「クリプトサイト」と呼ばれる、通常(アポ構造)は閉じているが薬剤が結合したとき(ホロ構造)に形成される隠れたリガンド(薬剤)結合部位が存在することが知られており、新たな創薬標的としての応用が期待されている[1]。しかし、これまで発見されているクリプトサイトの多くは、構造生物学解析によって決定されたリガンドと標的タンパク質のホロ構造とアポ構造の比較によって、偶然確認されるものが多い。クリプトサイトを有するタンパク質をアポ構造から予測することができれば、新規標的タンパク質発見が可能になり、新たな創薬研究の展開が期待される。現在、クリプトサイトを誘導する特徴的なフラグメント分子を共溶媒した実験や、分子動力学シミュレーションなどにより、クリプトサイトを予測する手法の開発への取り組みがなされているが、フラグメント分子の汎用性や、大規模なシミュレーション時間を要するなど課題が多い[1-3]。

図 1クリプトサイトと通常のポケットの例(アポ構造：2ZB1A, ホロ構造：2NPQA)

1.2 研究目的

本研究ではアポ構造のタンパク質構造を入力として、クリプトサイトの有無を分類する機械学習モデルすることを目的とする。また生成した機械学習モデルからクリプトサイトの因子評価を試みる。