

課題名 (タイトル) :

## 糖鎖インフォマティクス

利用者氏名 : 加藤 雅樹

理研での所属研究室名 : 和光研究所 基幹研究所 ケミカルバイオロジー研究領域  
システム糖鎖生物学研究グループ 糖鎖構造生物学研究チーム

### 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

ゲノムにコードされている多くの糖転移酵素やレクチンなどの糖関連タンパク質は、特有の立体構造 (フォールド) を形成して初めて特定の機能を発現する。未知の糖関連タンパク質の機能を予測する場合、配列相同性などのアミノ酸配列解析を用いて進化的な関連性を見つけるのが一般的であるが、その手法には限界があり、進化上、タンパク質のフォールドはアミノ酸配列よりも保存されやすいことが知られている。そのような背景のもと、我々はアミノ酸配列解析に加えて、立体構造の特徴を利用して未知の糖鎖関連タンパク質の機能を予測する手法の開発を行っている。

### 2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究では、PDB(Protein Data Bank)に登録されている糖鎖関連タンパク質の立体構造を収集して、フォールドの分類・特徴抽出を行った。

### 3. 結果

フォールドの分類解析の結果からアミノ酸相同性では見出すことが困難なものについてもフォールドの類似性を示すものが見いだされた。

### 4. まとめ

以上の結果より糖関連タンパク質の配列相同性だけでは見いだされない糖関連タンパク質のフォールドの関係性を見いだした。また、この結果から、各フォールドに特徴的なアミノ酸配列を抽出し、学習アルゴリズムを利用して機能未知の糖関連タンパク質をアミノ酸配列から予測することを可能にした。

### 5. 今後の計画・展望

本課題の成果から、糖関連タンパク質と予測されるタンパク質の候補を絞り込むことに成功した。これらのタンパク質候補を wet の実験者と協力して詳細な生物学的な機能を明らかにさせていく予定である。

### 6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

本課題の成果では糖関連タンパク質の候補を絞り込むことを可能にした。しかしながら、基質である糖がどのようなものであるかとかといった詳細な生物学的情報を見いだすことは困難である。今後は糖関連タンパク質と糖鎖の立体構造のダイナミクスを含めた解析を行い、より詳細な機能予測の手法の確立を行う。

平成 23 年度 RICC 利用研究成果リスト

**【国際会議、学会などでの口頭発表】**

Kato Masaki, Yoshiki Yamaguchi

RIKEN Glycan Conformation Database:

9/11/2011 Annual Conference of the Society for Glycobiology, Seattle