

平成30年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

がん遺伝子に見られるグアニン四重鎖構造を検出する結合性環状ポリアミドリガンドの開発  
Development of cyclic polyamides as the specific G-quadruplex DNA probes in oncogenes

京都大学大学院 理学研究科 化学専攻 朝光 世煌

#### 研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、がんや遺伝子疾患との関連が示されている DNA 高次構造、グアニン四重鎖構造(G4)とそのリガンドとの相互作用の特性を計算科学的アプローチにより検討した。その結果、Discovery studio のドッキングプログラム(cDOCKER)によって、実験データを支持する重要なデータを得ることに成功した。今回の分子モデリング解析の計算は研究室保有の local server を使用して実施したが、今後はスーパーコンピュータシステムの計算サーバーを使用することによって、関連する新規 DNA 結合性タンパク質と G4 DNA との相互作用、並びに前述したリガンドとの関係性を検討する。

発表論文(謝辞あり)

なし.

発表論文(謝辞なし)

Asamitsu S., Obata S., Phan A. T., Hashiya K., Bando T., Sugiyama H.

Simultaneous Binding of Hybrid Molecules Constructed with Dual DNA-Binding Components to a G-Quadruplex and Its Proximal Duplex.

*Chem. Eur. J.*, 24, 4428-4435 (2018)