

新規抗菌薬の開発を目標とした病原性細菌由来タンパク質の立体構造予測
Structure prediction of proteins from pathogenic bacteria for the development of new
antimicrobial drugs

国立感染症研究所 細菌第二部 第四室 森 茂太郎

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、病原性細菌由来タンパク質の立体構造予測を行うことによって、新規抗菌薬の開発に結びつけることを目標としている。今年度は、AlphaFold2ならびにRoseTTAFoldを用いて、結核菌由来 DNA gyrase (図を参照) や *Mycoplasma pneumoniae* 由来細胞接着タンパク質、ヘリコバクター属細菌由来オートトランスポータータンパク質の立体構造について予測を行った。得られた立体構造の予測モデルを既知の立体構造と比較することによって、薬剤の標的となるタンパク質の機能発現に重要だと思われる構造部位を推定することができた。今後、詳細な機能構造相関解析を行う予定である。また、病原性細菌由来の他の標的タンパク質についても引き続き立体構造の予測を進める。



図; 結核菌由来 DNA gyrase (複合体) の立体構造予測モデル (AlphaFold2)