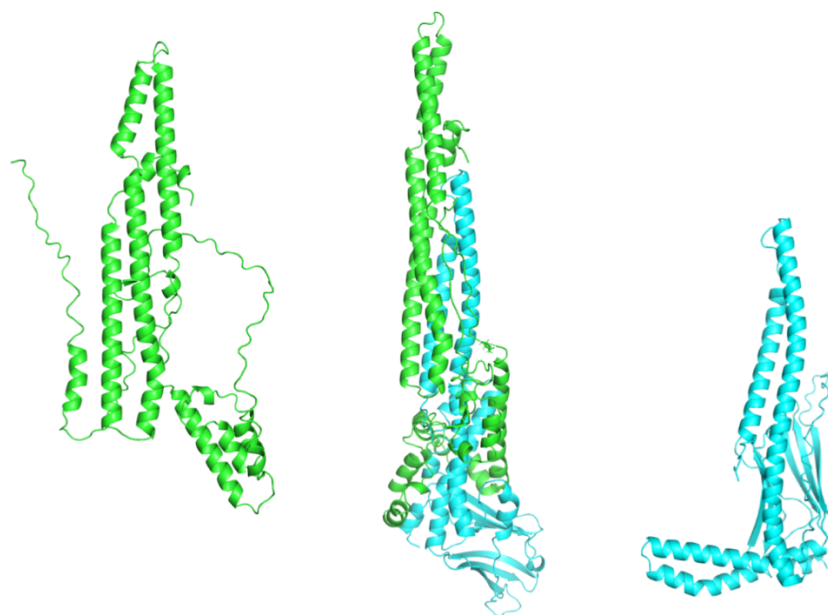


新規抗菌薬の開発を目標とした病原性細菌由来タンパク質の立体構造予測
Structure prediction of proteins from pathogenic bacteria for the development of new
antimicrobial drugs

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、結核菌の細胞表層に存在している PPE17、PE17 タンパク質について、それぞれ単独の立体構造と複合体の立体構造を AlphaFold2 で予測した (図を参照)。得られた立体構造の予測モデルを用いることによって、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。



(図) 左; PPE17 タンパク質, 中央; PPE17-PE17 タンパク質複合体, 右; PE17 タンパク質