

DNA 配列空間に新規機能を予測する情報技術
Prediction of unknown function of proteins in sequence space

理化学研究所 開拓研究本部 鈴木地球・惑星生命科学研究室 大前 公保

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、DNA 配列空間に新規機能を予測する新たな情報技術の確立を目指す。今年度の主な研究成果は以下のとおりである。

(1) 大規模微生物ゲノムデータを最新バージョンに更新し、11 万種以上の原核生物ゲノムより効率的に遺伝子探索を行えるデータセットを構築した。(2) (1) で構築したデータセットから、現時点で世界最大規模の CO デヒドロゲナーゼのデータベースを構築した。本データベースにゲノミックコンテキスト、生息環境、および AlphaFold の予測構造情報を統合した。また、ガストンネル構造の予測・解析パイプラインを開発し、CODH の進化に伴うガストンネルのダイナミックな構造変化を明らかにした。(3) ヒトの陽イオントランスポーターであり、病原性との関与も指摘されている遺伝子の細菌ホモログ (MgtC) について、ドメイン構造に多様性があることを明らかにし、未知の輸送メカニズムを持つと推定される新規ホモログを見出した。また、真核生物に保存される P2X チャネル型 ATP 受容体にも同様の解析を行い、新規遺伝子をいくつか見出した。これらの新規遺伝子については、現在、構造生物学研究が進行中である。