

2010  
6/28



アドバンスソフト技術セミナー  
生体分子量子化学計算ソフトウェアAdvance/BioStation(ADBS)

ADBS活用事例1: FMO法計算によるドッキング構造の再評価

アドバンスソフト株式会社  
技術第2部 主事研究員  
長谷川 浩司

2.

発表概要

ADBSの利点

生体分子の相互作用が量子化学計算で求まる



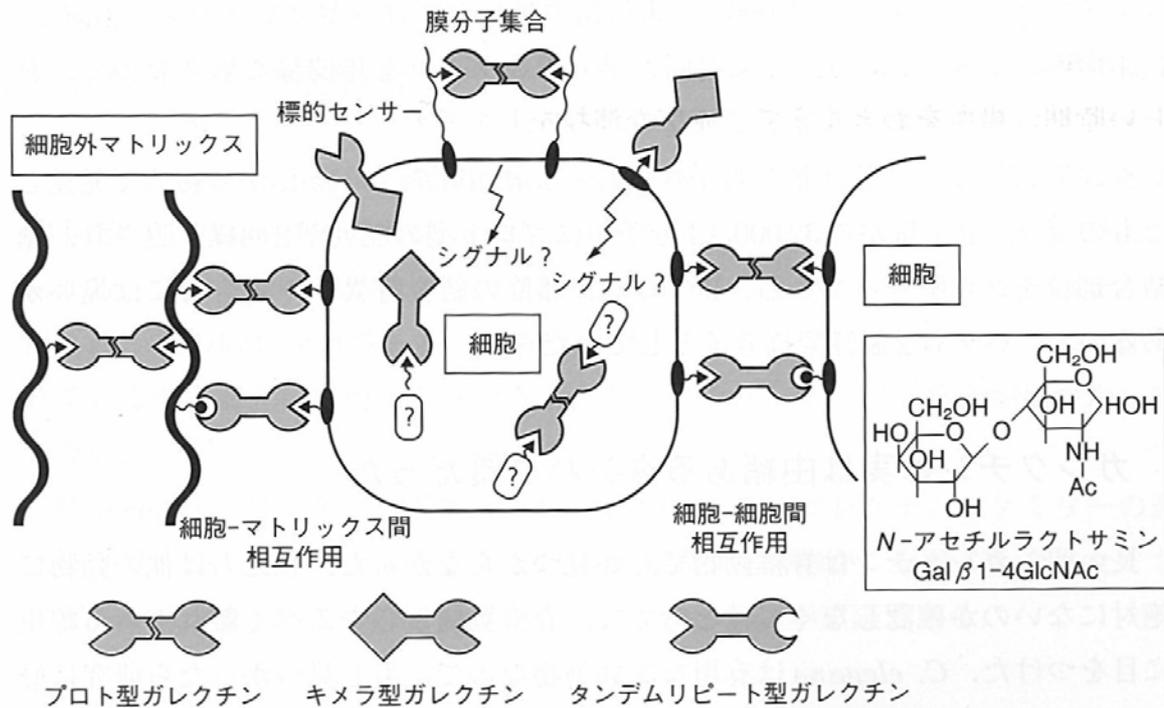
活用1: 蛋白質とリガンドとの相互作用

活用2: 蛋白質の分子内相互作用

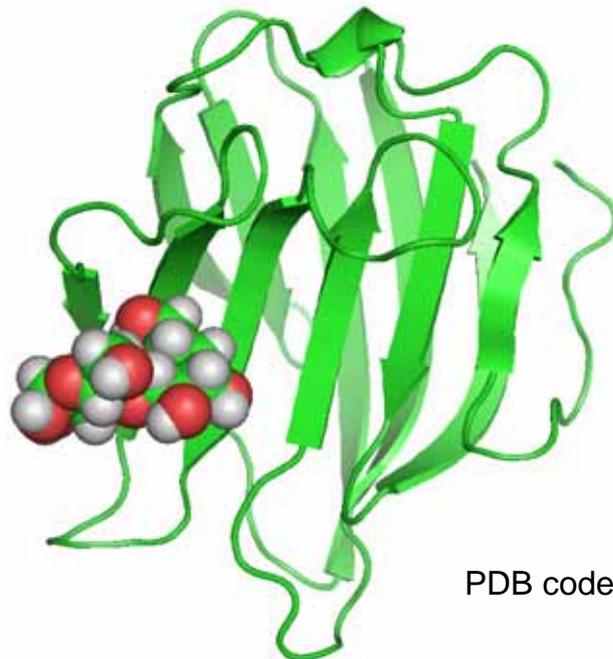
活用事例2でご説明







糖と脂質の生物学(共立出版)

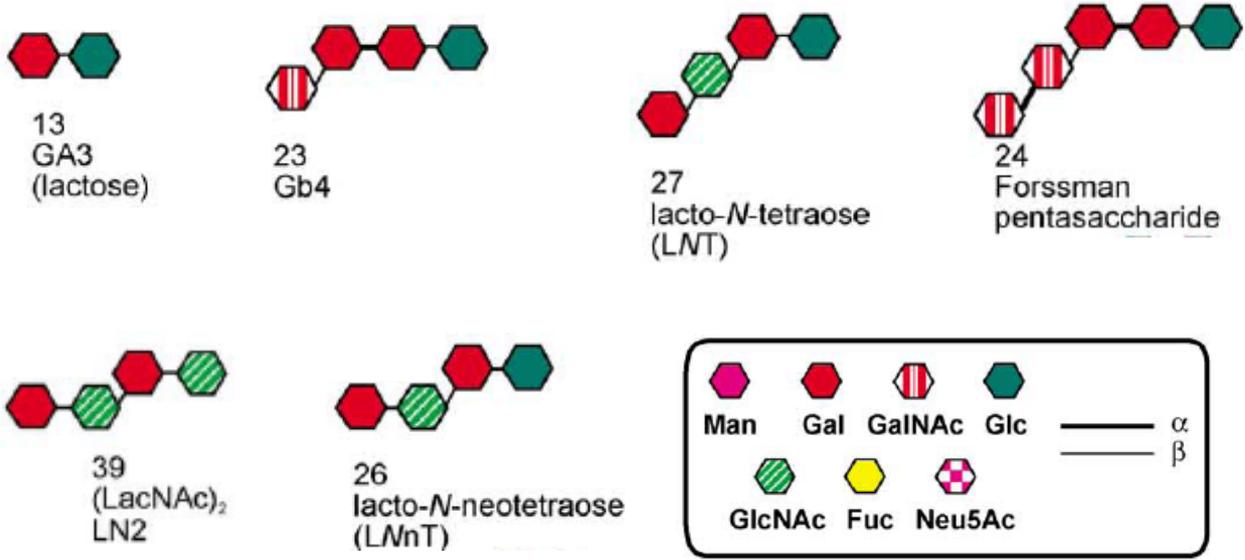


PDB code: 2D6M



# ガレクチンに結合する糖鎖 (一部)

事例: リガンドとの結合評価

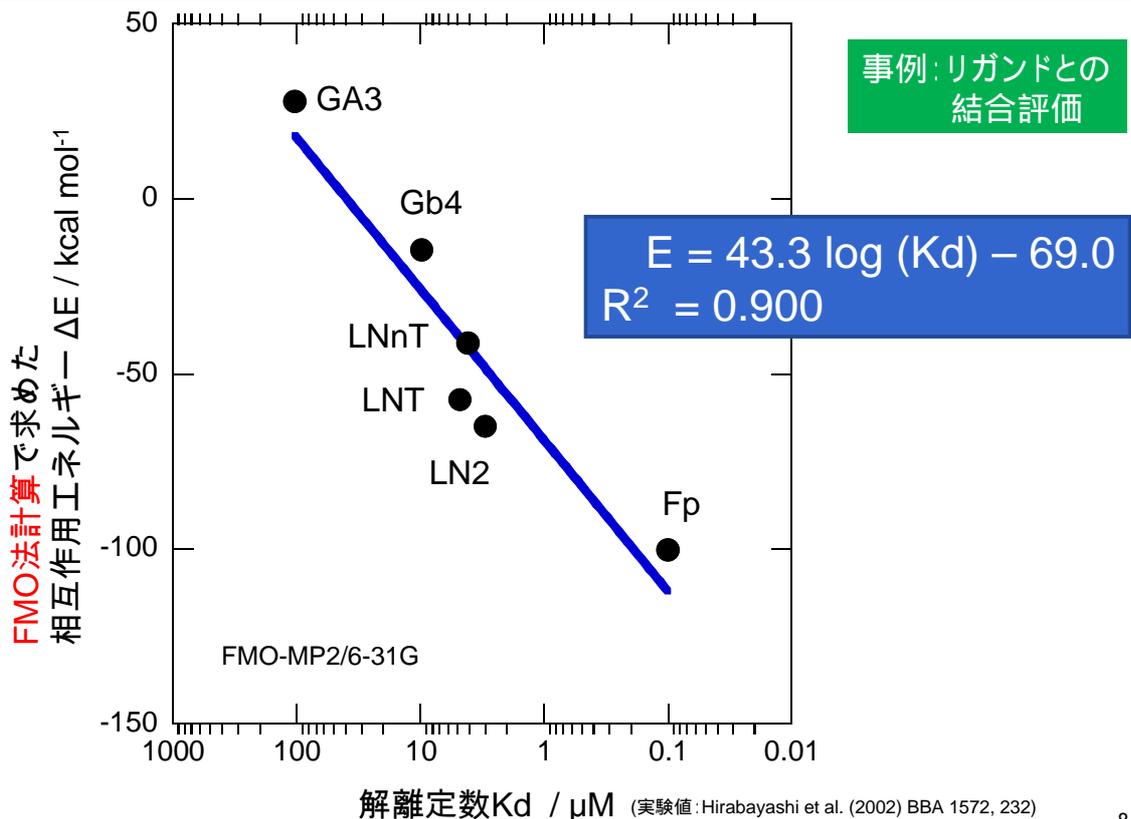


Hirabayashi et al. (2002) BBA 1572, 232.



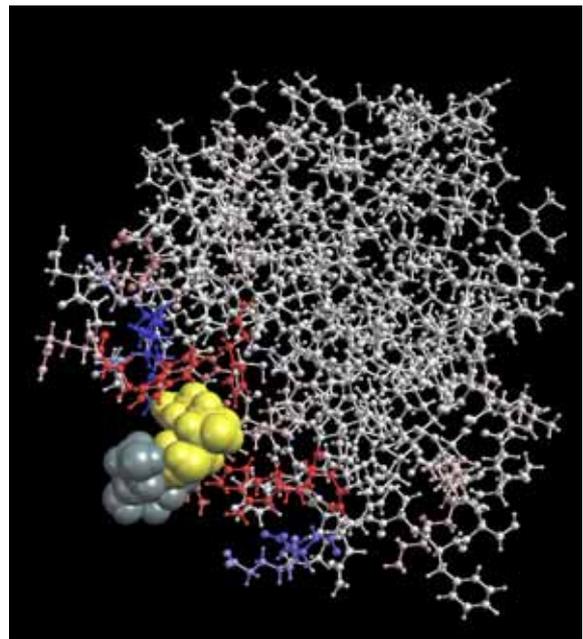
# ガレクチンと糖鎖との結合エネルギーと解離定数の関係

事例: リガンドとの結合評価



# リガンドーアミノ酸残基間の相互作用解析

ラクトース結合ガレクチン  
(PDB code 2D6N)



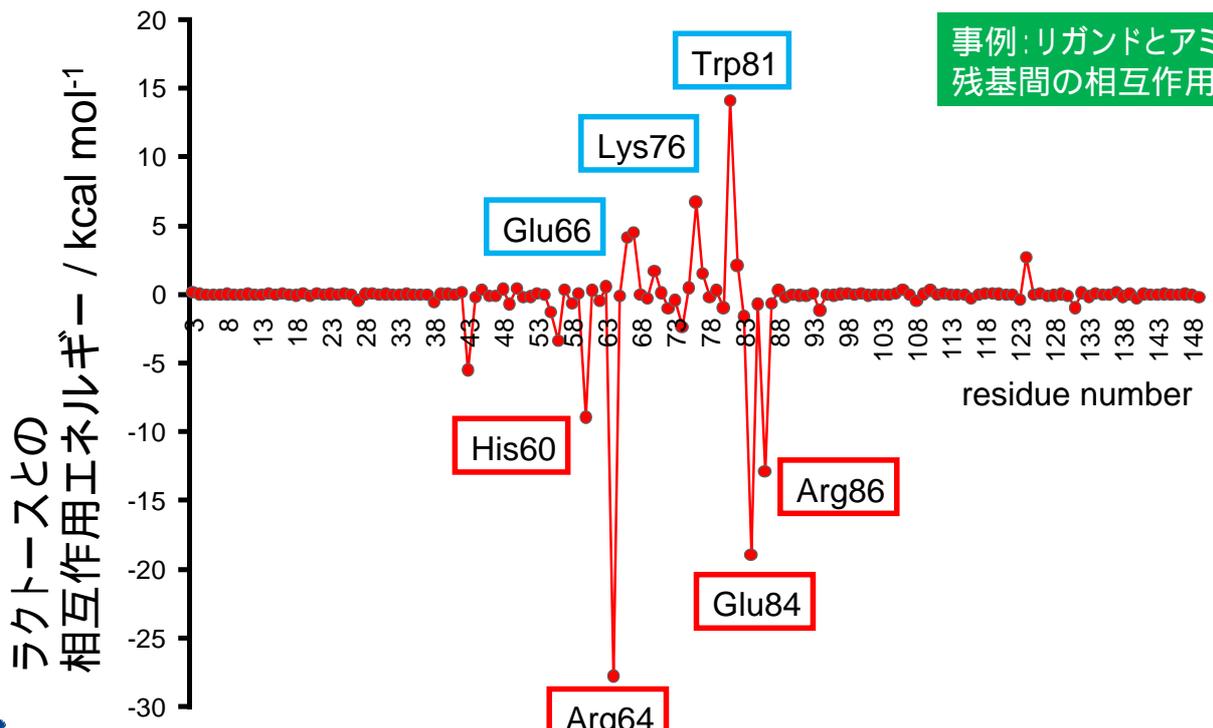
事例:リガンドとアミノ酸  
残基間の相互作用解析

アミノ酸残基ごとのリガンド結合の詳細な分析

➡ アミノ酸残基の機能解明・新規リガンド開発



# リガンドーアミノ酸残基間の相互作用解析



事例:リガンドとアミノ酸  
残基間の相互作用解析

➡ グラフにすると理解しやすい



# ドッキング構造の再評価

結晶構造等

ホモロジーモデリング

リガンドのドッキング計算

ベストポーズ

蛋白質 - リガンド複合体

ADBSによるリガンド結合の高精度評価

正しい複合体構造(ドッキング構造)が前提

?

ドッキング構造の検証(実験事実より)

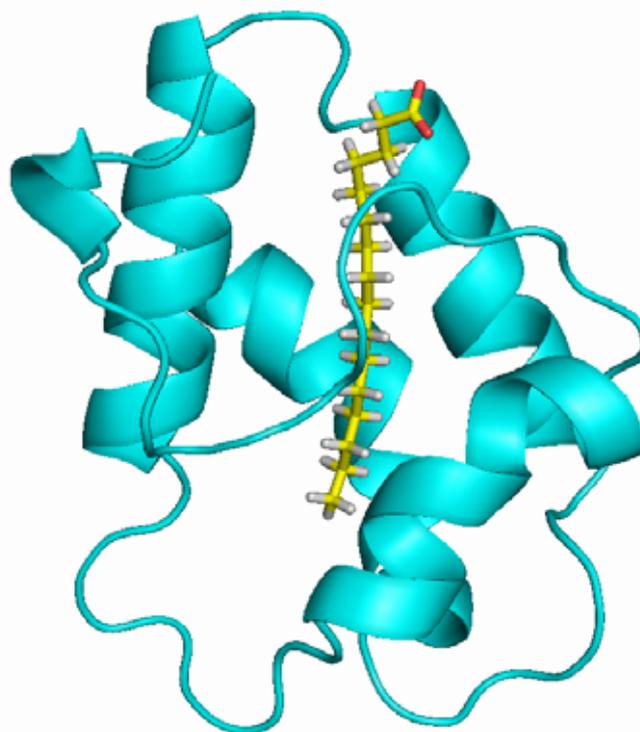
ADBSによるドッキング構造の再評価



11

## 非特異的脂質輸送蛋白質(nsLTP)

事例:ドッキング構造の再評価

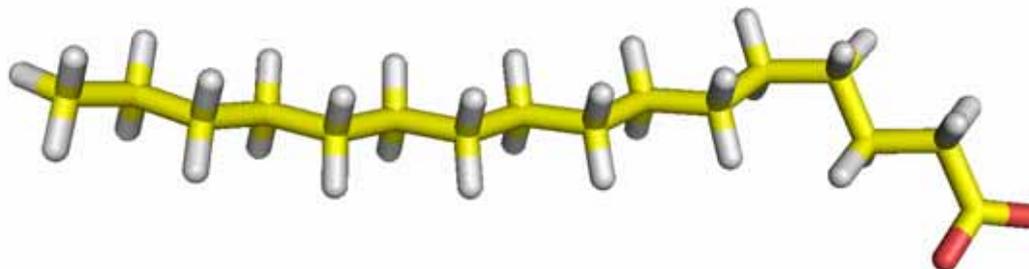


PDB code 1UVB



12

パルミチン酸(飽和脂肪酸)



長鎖炭化水素

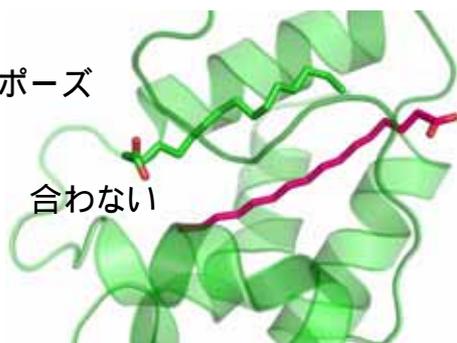


ドッキング計算での配座予測は苦手  
スコア関数は古典力場に基づく



第1位  
ベストポーズ

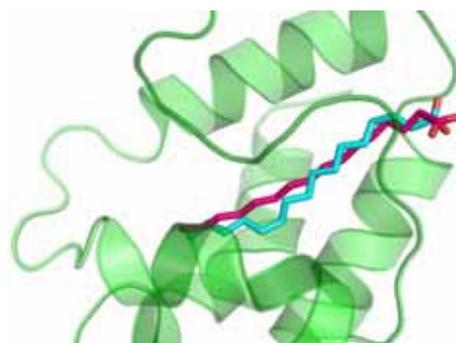
合わない



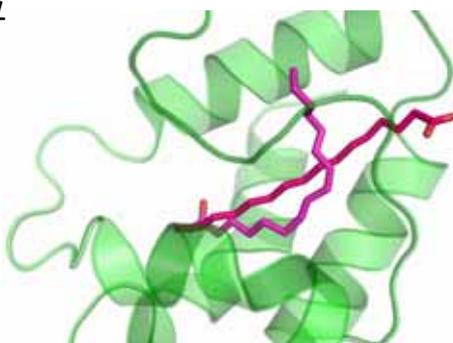
結晶構造

第2位

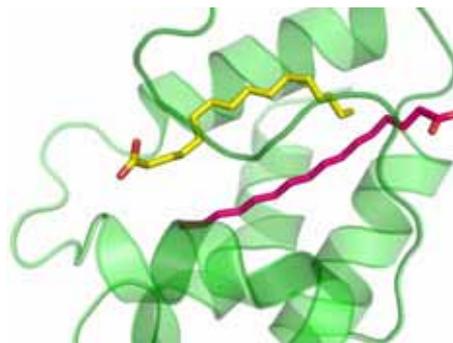
類似



第3位



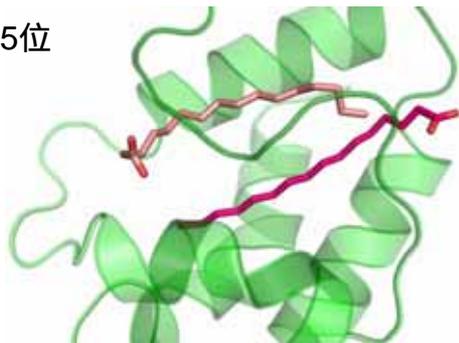
第4位



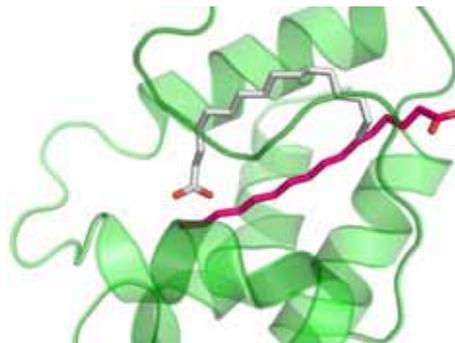
# nsLTPと脂質分子とのドッキング計算

事例:ドッキング構造の再評価

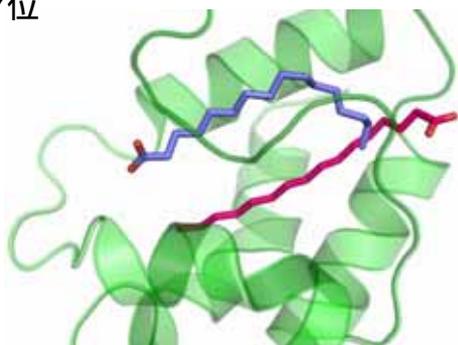
第5位



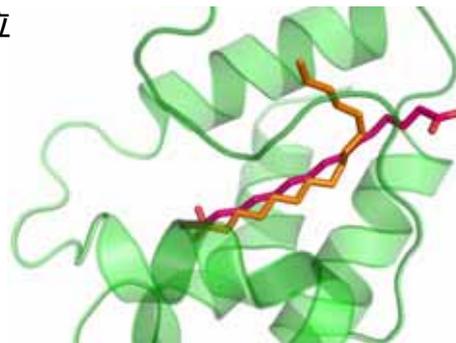
第6位



第7位

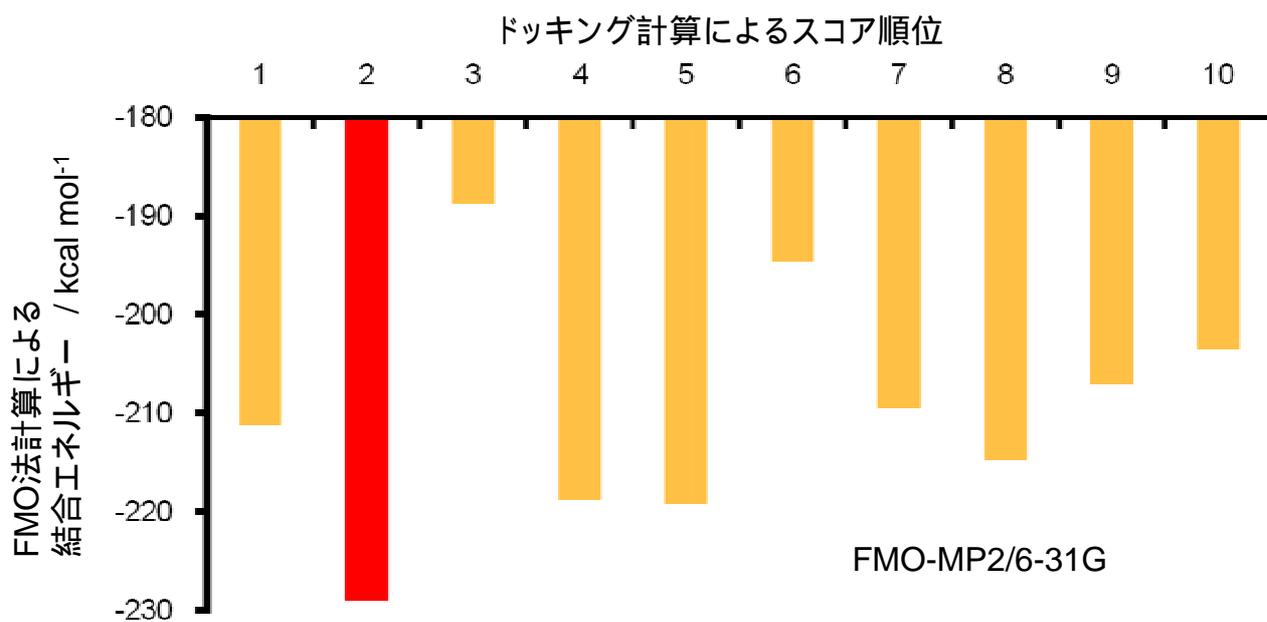


第8位



# nsLTPと脂質分子との結合エネルギー

事例:ドッキング構造の再評価



ドッキング構造の再評価にADBSを活用



## ADBSの活用1: 蛋白質とリガンドとの相互作用

### 蛋白質-リガンド間の結合評価

→ リガンドの結合性の検証に

### リガンド-アミノ酸残基間の相互作用解析

→ リガンド結合の詳細な解析に

### ドッキング構造の再評価

→ ドッキング計算の検証ツールに

ADBSをご活用くださ

い

