

AIを用いたタンパク質間相互作用の迅速スクリーニング

大阪大学 生命機能研究科 河口真一

目的：

生命現象の根幹であるタンパク質の働きは、多くの場合、相互作用を通じて発揮される。大規模なタンパク質間の相互作用候補について、AIによる複合体予測を行い、生化学的実験へのボトルネックを緩和することである。

内容：

生殖細胞に存在するタンパク質集積体（ヌアージュ顆粒）に局在する20種類のタンパク質間について、AlphaFold2を用いた複合体予測を行った。

結果：

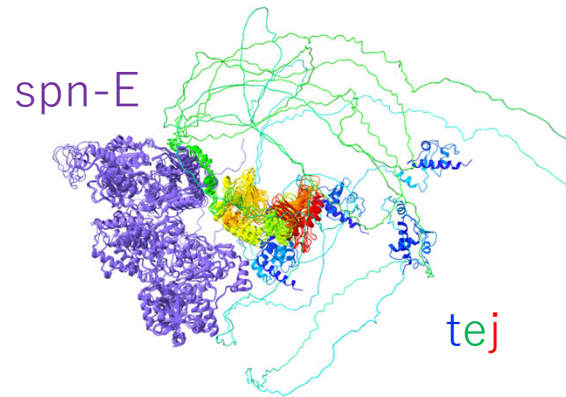
Spn-EとTejというタンパク質ペアの場合、Tejタンパク質のC末側ドメインがSpn-Eと相互作用することが予測された。その他にも、高いスコアを示すタンパク質ペアが得られており、in silicoスクリーニングの有効性が示された。

利用した計算機

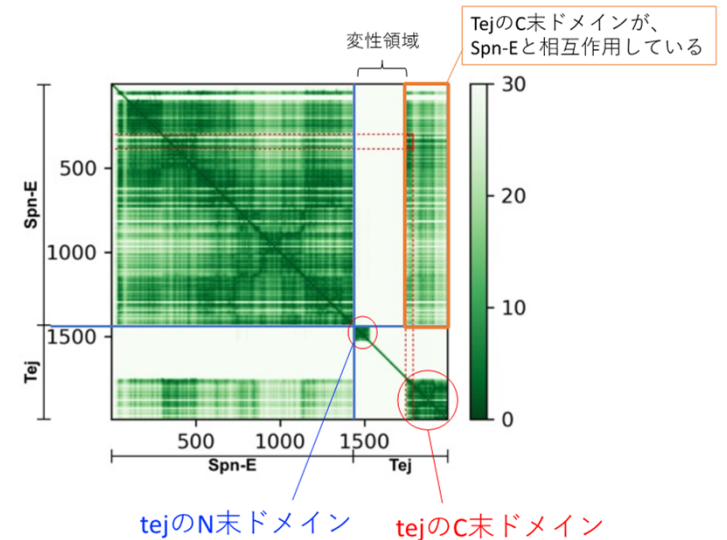
SQUID GPUノード群

ノード時間：1000時間

利用したソフト：AlphaFold2



予測複合体に対するPAEプロット
(濃い緑で示される領域は、構造の信頼性が高い)



- 予測された5つの複合体構造をSpn-Eで重ね合わせた。
- TejのN末ドメインは、Spn-Eとの結合に関与していない。
- Tejのヘリックスで、Spn-Eと結合している。