

「タンパク質立体構造予測のこれまでとこれから」

中村周吾 教授

(東洋大学 情報連携学部 情報連携学科)

日時：2023年2月7日(火) 14:40—16:10

場所：12号館101室

概要

タンパク質は、そのアミノ酸配列が遺伝情報としてコードされており、翻訳されると、決まった立体構造に折れたたまり、周囲の分子と相互作用することで決まった機能を果たす。つまりタンパク質の立体構造情報は、情報学の視点から見ると「20種類の文字が1次元的に並んだ文字列」にすべて含まれている。この「文字列に内在する立体構造情報」の取り出し、すなわちアミノ酸配列からのタンパク質立体構造予測は、50年にわたってさまざまな方法が考えられてきたが、非常に困難な問題であり、決定的な成果は得られていなかった。

しかし2021年7月にDeepMind社が一般公開した深層学習ベースのAlphaFold2 (AF2)は、多数のタンパク質の立体構造を実験的手法と同等の精度で予測できることを示した。AF2がもたらしたインパクトは衝撃的であり、それから1年も経たないうちに、主要なタンパク質データベースの各エントリには、AF2による予測立体構造が付記されるまでになっている。

本講義では、AF2の登場以前のタンパク質立体構造予測、AF2の概要、AF2登場以来の分野の動向などを紹介する。

連絡先：理学研究科 化学専攻 池谷鉄兵 (内線:3525、e-mail: tikeya@tmu.ac.jp)