

## 제12회 고등과학원 단백질구조와 기능 학회

The 12th KIAS Conference on Protein Structure and Function

2012. 10. 11 ~ 2012. 10. 13

○ 글\_윤제성·고등과학원 계산과학부 연구원

2012년 10월 11일부터 13일까지 3일에 걸쳐 제12회 단백질 구조 및 기능에 관한 국제학회(KIAS Conference on Protein Structure and Function)가 고등과학원에서 성황리에 개최되었다. 본 학회는 계산과학부 이주영 교수를 주축으로 한 창의 연구단(Center for In Silico Protein Science) 주관으로 2001년부터 해마다 고등과학원에서 개최되어 왔다. 단백질 연구의 최근 동향에 대한 국내외 연구자들의 발표 및 정보교환, 그리고 국내 학생들의 포스터 발표 등을 통한 연구교류 경험 및 연구에 대한 동기유발을 얻는 장으로 활용되어 왔다. 이번 학회에서는 단백질 구조결정, 구조예측, regulation mechanism, biological network detection, aggregation, drug design, capsid mechanics 등 다양한 주제에 대한 실험 및 이론적 연구에 대하여 25명의 국내외 연사의 구두발표 및 23편의 포스터 발표가 진행되었다.

첫째 날은 세션 1에서 세션 4까지 10개의 발표가 이루어졌다. 세션 1에서는 protein-oleic acid complex의 tumor toxicity에 대한 구조적 연구(IMS, Kuwajima)와 tumor metastasis suppressing gene의 regulation mechanism에 대한 연구결과(이화여대, 신동해)가 발표되었다. 세션 2에서는 protein structure model에 대한 새로운 quality assessment 방법(Kitasato U, Takeda-Shitaka)과 GALAXY protein modeling package(서울대, 석차옥)에 대한 소개가 발표되었다. 세션 3에서는 microsecond All atom MD simulation 계산을 통한 protein complex의 configurational state change 관찰 및 실험과의 비교연구(Case Western Reserve U, Matthias Buck), Chaperone Hsp90 과 client protein p53 간의 interaction에 관한 spectroscopic study(가천대, 박성진), electrospray ionization mass spectrometry(ESI-MS)를 이용한 DNA-binding characteristics assay of zinc-fingers 연구(서강대, 오한빈)에 대한 내용이 발표되었다. 마지막 세션 4에서는 생물학적 주기성과 관련하여 ATPase activity의 negative feedback regulation의 dynamic structural bases에 대한 연구(IMS, Akiyama), structure DB를 이용한 glycan structure modeling(U of Kansas, 임원필), community detection을 이용한 large-scale biological network 연구(KIAS, 이주영)에 대한 내용이 발표되었다. 그리고 구두발표 세션이 끝난 후에는 포스터 세션이 이어졌다.

둘째 날도 첫째 날과 마찬가지로 세션 5에서 세션 8까지 네 개의 세션에 10개의 발표가 이루어

어졌다. 세션 5는 intrinsically disordered protein termini의 biological function(U of Alberta, Brian D. Sykes), signaling pathway에서 protein–ligand interaction의 inhibition에 의한 tumor invasiveness와 metastasis의 약화(Sanford–Burnham Medical Research Institute, 유원규) 등 실험분야에 대해서, 세션 6은 MD simulation과 network analysis를 통한 GPCR 단백질의 allosteric signaling pathways의 규명(KIAS, 현창봉), coarse–grained model simulation을 이용하여 multidomain protein의 catalytic reaction에서의 local frustration의 역할에 대한 논의를 통한 consistency principle(principle of minimal frustration)의 재조명(Nagoya U, Masaki Sasai) 등 이론 연구에 대한 발표가 이어졌다.

세션 7에서는 UNRES model에 기반한 mean field dipole–dipole interaction을 통한 다양한 단백질의 이차구조 재현(U of Gdansk, Jozef Adam Liwo), MD simulation과 통계역학 이론을 이용한 F1–ATPase의 회전운동 기작의 규명(Yokohama City U, Mitsunori Ikeguchi), thioredoxin reductase protein 구조에 대한 MD simulation 연구(경상대, 이근우) 등 이론연구 주제가 발표되었고, 세션 8에서는 HpUreI proton–gated urea channel의 결정구조(U of California, Harmut Luecke), novel beta–structure of YLR301w protein의 결정구조(KIST, Eunice E. Kim), fragment based screening 과 structure based approach를 통한 항감염물질의 개발(Monash U, Raymond S. Norton) 등 주로 단백질 결정구조에 대한 실험연구 주제가 발표되었다. 둘째 날 세션이 끝난 후에는 홀리데이 인 성북에서 Banquet이 열렸다.

마지막 셋째 날은 오전 동안 세션 9, 10에서 5개의 발표가 이루어졌다. 세션 9에서는 Toll–like receptor(TLR)의 protein ligand recognition의 구조적 기작 규명을 위한 결정구조 연구(강원대, 윤성일), time dependent FRET과 targeted mutation을 통한 enzyme(adelylate kinase)의 catalytic function과 구조적 동역학 및 유전자 코딩 사이의 연관관계 연구(Fudan U, Yan–Wen Tan), IP3R의 regulatory mechanism에 대한 구조적 연구(아주대, 서민택)에 대한 발표가 이루어졌다. 마지막 세션인 세션 10에서는 실험 및 계산을 통한 CCMV capsid mechanics의 structural transition 및 energy landscape 연구(U of Massachusetts Lowell, Valeri Barsegov), explicit water를 포함한



all atom simulation과 integral equation theory를 이용한 protein aggregation process에서 물의 역할에 관한 연구(숙명여대, 함시현) 등의 발표가 이루어졌다.

3일 간의 짧은 일정임에도 불구하고 매우 다양한 주제에 대해서 많은 내용의 연구발표가 이루어졌다. 다소 빠박하게 느껴진 감도 없지 않아 있지만, 실험 및 이론 분야의 새롭고 흥미로운 최신 연구 동향들을 비교적 짧은 시간 동안 다양하게 접할 수 있는 기회였다는 소회가 든다. 알찬 내용으로 발표를 해 주신 모든 발표자 분들께 감사를 드리며, 순조롭고 훌륭하게 학회가 진행될 수 있도록 진력해주신 인 실리코 단백질 연구단 및 관계자 여러분의 노고에 감사 드린다. 내년에도 많은 연구자들의 좋은 발표와 함께 더욱 성황리에 진행될 것을 기대하며 글을 마친다.