

提出日：平成 29 年 5 月 19 日

平成 28 年度 大阪大学蛋白質研究所 拠点事業

(2) 研究成果の概要

課題名	抗原-抗体間のフレキシブルドッキング分子動力学シミュレーションに関する研究		
研究代表者	氏名	神谷 成敏	
	所属機関名・部局名	兵庫県立大学大学院・シミュレーション学研究科	
	職名	特任教授	
事業名 (該当の事業名の右欄に○)	○	共同研究員	
		超高磁場NMR 共同利用研究課題	
		クライオ電子顕微鏡共同利用研究課題	
		客員フェロー	
蛋白研受入担当教員名	中村 春木		
<p>ガン細胞で過剰発現する human carbonic anhydrase IX のエピトープ配列とそれを認識する M75 モノクローナル抗体を用いて、Multicanonical Molecular Dynamics (McMD)法によるドッキングシミュレーションを行った。McMD によって 280–700 K の範囲において平らな分布が得られたことから、正確な状態密度を求めることができた。主成分分析 (PCA) を用いて得られた温度 300 K における自由エネルギー地形から、自由エネルギー最安定構造が天然構造に類似し、二番目に安定な構造が天然構造に極めて近い構造をしていたことから、McMD と PCA による解析によって得られた自由エネルギーを評価関数とすることで、高精度で予測することに成功した。</p>			

※本様式は、“拠点事業成果報告”として、拠点ホームページにて公開させていただく予定です。

※必ず A4 用紙 1 枚におさめて下さい。 ※提出期限：平成 29 年 5 月 19 日（金） ※提出の際は PDF 変換して下さい。

※提出先：大阪大学蛋白質研究所拠点プロジェクト班 E-mail: tanpakuken-kyoten@office.osaka-u.ac.jp