

提出日：平成 30 年 5 月 16 日

平成 29 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	分子動力学シミュレーションによる抗体の熱安定性予測		
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○)	<input type="radio"/>	共同研究員	
	<input type="radio"/>	超高磁場NMR 共同利用研究課題	
	<input type="radio"/>	クライオ電子顕微鏡共同利用研究課題	
	<input type="radio"/>	客員フェロー	
蛋白研受入担当教員名	中村 春木		
<p>抗体の熱安定性予測するための手法を開発するために、融点異なる複数の抗体に対して分子動力学シミュレーションを実施した。実験から得られた抗体の融点と、常温から高温までの 100 ns の複数のシミュレーションから得られた天然コンタクトの保持率 Q value との間に高い相関があることを見出した。特に親水性コンタクト間の Q value は非常に高い相関があった。この結果から、親水性コンタクトに注目した抗体のデザインやシミュレーションによる抗体の安定性の評価によって、より効率的に抗体を生産、評価することが期待される。今後は、抗体だけでなく他のタンパク質に対して本研究の分子動力学シミュレーションによる解析を適用して、タンパク質の物性を評価する方法を確立したい。</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 30 年 5 月 18 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