

# 第19回 鴨叡会・生命分子化学科セミナー

## 《講師》

神谷 成敏 先生（大阪大学 蛋白質研究所）

## 《演題》

コンピュータによる抗原-抗体間の複合体構造予測法の開発

《日時》 3月13日(木)午後3時30分から

《場所》 京都府立大学附属図書館3階視聴覚室

## 《講演内容》

近年、抗体薬が注目され、抗原親和性の高い抗体をデザインするための手法の開発が望まれている。抗体のデザインには、第一に抗原-抗体間の複合体構造を正確に予測する必要があり、第二に複合体の親和性を正確に予測する必要がある。通常、抗体のデザインは実験的手法によって行われており、膨大な時間や費用がかかる。われわれは、抗原-抗体間の複合体構造の予測や親和性の評価をコンピュータによって行う。こうすることで、低コストで抗体のデザインが可能となる。われわれは、新規に分子動力学シミュレーションと溶媒和自由エネルギーを考慮した親和性の評価法を組み合わせた方法を開発し、抗原-抗体間のドッキング計算で得られた膨大な数の候補構造を本法でランキングしたところ、天然構造が上位になることが示された。

## 《連絡先》

織田 昌幸（生命物理化学研究室）

E-mail; oda@kpu.ac.jp, Phone; 075-703-5673