

提出日：平成 28 年 5 月 11 日

平成 27 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	マルチカノニカル分子動力学法による抗原ペプチドの立体構造探索に関する研究		
研究代表者	氏名	神谷 成敏	
	所属機関名・部局名	国立研究開発法人理化学研究所・計算科学研究機構	
	職名	研究員	
事業名 (該当の事業名の右欄に○)	<input type="radio"/>	共同研究員	
	<input type="radio"/>	国際共同研究課題	
	<input type="radio"/>	超高磁場NMR 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>ガン細胞で過剰発現する human carbonic anhydrase IX のエピトープ配列 (PG EEDLP) を持つ抗原ペプチドとそれを認識する抗体の作用機序を解明するため、抗原ペプチド単体の水溶液中におけるマルチカノニカル分子動力学(McMD)法による立体構造探索を行った。280K から700K の広い温度領域においてフラットなエネルギーの確率分布が得られたことから、McMD シミュレーションが正常に終了した。McMD シミュレーションで得られた300K の構造アンサンブルを主成分解析法で解析し、第一主成分軸と第二主成分軸を用いて自由エネルギー地形を作成した。300K の自由エネルギー地形は、安定な曲がった構造を持つクラスターとそれ以外の準安定な領域から成ることが明らかになった。報告されている複合体構造中の抗原の構造は、伸びた分子内水素結合が無い構造をしているが、McMD シミュレーションから得られた常温の天然構造に近い構造には、分子内水素結合が見られた。また、報告されている複合体構造中の抗原は、抗体との間に水素結合を形成している。以上から、抗原の結合メカニズムは、伸びた構造を抗体が選択後、抗原の分子内相互作用が抗原抗体の分子間相互作用に置き換わりながら、安定な複合体を形成するものと予測できる。</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 28 年 5 月 20 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