

## 【研究活動・実績】

### 1. 概要

WPI-SKCM<sup>2</sup>主任研究者の Shang-Te Danny Hsu 博士（台湾 Academia Sinica に在籍）が、“Rapid simulation of glycoprotein structures by grafting and steric exclusion of glycan conformer libraries”というタイトルの論文を国際的に著名な学術雑誌 Cell（インパクトファクター: 64.5）に発表した。（<https://doi.org/10.1016/j.cell.2024.01.034>）本研究では、タンパク質の表面を覆う糖鎖の動的構造を高効率で予測するソフトウェア「GlycoSHIELD」を開発した。分子動力学計算、クライオ電子顕微鏡、小角 X 線散乱、および質量分析で得られたデータとあわせて「GlycoSHIELD」を用いることで、糖鎖が結合したタンパク質全体の立体構造をより正確に決定できることを示した。「GlycoSHIELD」を用いたシミュレーションは市販のパソコンで実行可能なため、本成果により、スーパーコンピューターを用いても数十年かかる糖タンパク質の構造計算を短期間で行えるようになった。本成果を応用することで、例えば、COVID-19 ウイルスのスパイクタンパク質の表面を覆う糖鎖構造を明らかにし、ワクチンの効果をより正確に予測できる可能性がある。

A principal investigator of WPI-SKCM<sup>2</sup>, Dr. Shang-Te Danny Hsu (Academia Sinica in Taiwan), published a paper titled “Rapid simulation of glycoprotein structures by grafting and steric exclusion of glycan conformer libraries” in the internationally renowned journal Cell (Impact Factor: 64.5).

<https://doi.org/10.1016/j.cell.2024.01.034>

In this research, the authors developed GlycoSHIELD, a software suite to effectively simulate conformational dynamics of glycans which are grafted onto proteins and shield large fractions of the protein surface. Using molecular dynamics simulation, small-angle X-ray scattering, cryoelectron microscopy, and mass spectrometry, GlycoSHIELD provided enhanced models of glycoprotein structures. Since GlycoSHIELD can be implemented on personal computers, the method enables simulations of structures of glycosylated proteins in a short period of time, which would otherwise take several decades even with a supercomputer.

One of many applications of the reported method would be to reveal the conformations of glycans covering the surface of coronavirus spike proteins, which may allow for more accurate prediction of vaccine efficacy.

### 2. 参考情報

Facebook:

<https://www.facebook.com/people/SKCM2-Hiroshima-University/100093316933656/>

Instagram:

<https://www.instagram.com/p/C5FPPITLuZC/>

X:

[https://twitter.com/SKCM2\\_HU](https://twitter.com/SKCM2_HU)

### 3. お問い合わせ先 WPI 拠点

広島大学持続可能性に寄与するキラルノット超物質拠点(WPI-SKCM<sup>2</sup>)

[担当] 広島大学持続可能性に寄与するキラルノット超物質国際研究所事務室

[拠点ウェブページ] <https://wpi-skcm2.hiroshima-u.ac.jp/jp/>