

Water Dynamics around Osmolytes and Polymers Using Molecular Dynamics Simulations: Insights for the Design of Effective Protein Stabilizers

サレー ムディ アブ

<https://hdl.handle.net/2324/7396203>

出版情報 : Kyushu University, 2025, 博士 (工学) , 課程博士
バージョン :
権利関係 :



氏 名	SALEH MD ABU (サレー ムディ アブ)		
論 文 名	Water Dynamics around Osmolytes and Polymers Using Molecular Dynamics Simulations: Insights for the Design of Effective Protein Stabilizers (分子動力学シミュレーションを用いたオスモライトとポリマー周辺の水のダイナミクス：タンパク質安定化剤の設計への示唆)		
論文調査委員	主 査	九州大学	教授 田中 賢
	副 査	九州大学	教授 加藤 幸一郎
	副 査	九州大学	教授 森 健

論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

本研究は、タンパク質安定化剤周囲の水分子の状態を量子化学全原子分子動力学シミュレーションにより明らかにしている。タンパク質安定化に対して重要なパラメータとなる規格化した水素結合数を提案するとともに、高分子側鎖の分子設計指針を提案することに成功している。本研究で得られた知見は、医療用のタンパク質安定化のための分子設計において有益なものであり、界面化学、高分子化学および生体材料工学の発展に寄与するところが大きい。よって、本論文は博士（工学）の学位論文に値すると認める。