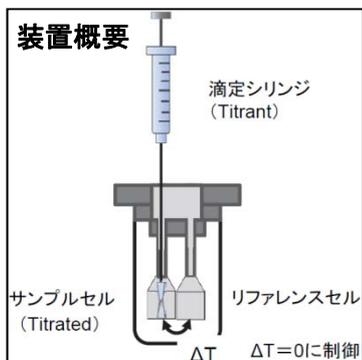


# 等温滴定カロリメトリーによる 分子間相互作用解析

等温滴定カロリメトリー(ITC)は、相互作用分子の結合に伴う熱変化を検出することで、結合定数( $K_d$ )、結合比( $n$ )、エンタルピー変化( $\Delta H$ )およびエントロピー変化( $\Delta S$ )の算出が可能です。また、得られた熱力学的プロファイルから、分子間の結合様式の推定が可能です。



## サンプル

化合物、ペプチド、核酸、タンパク質、リポソームなど

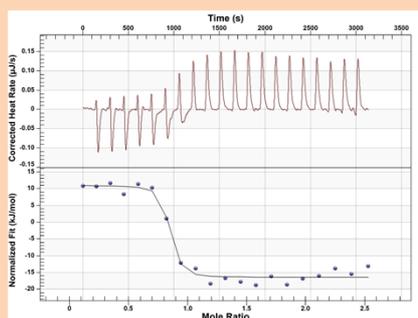
## 特徴

- ・熱力学的解析により結合様式を推定
- ・固定化、ラベル化などの修飾不要
- ・分子量制限がない
- ・nM~ $\mu$ M( $K_d$ )の相互作用解析が可能

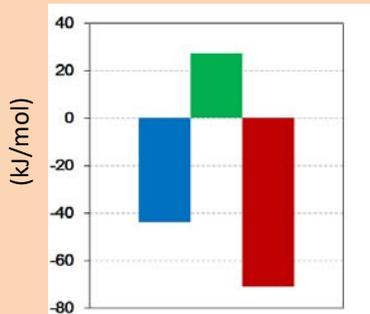
## 評価項目例

- 結合親和性の評価
- 結合様式の解析
- 医薬品候補化合物の選定
- 医薬品候補化合物の最適化
- 酵素反応速度論解析
- タンパク質(抗体)の品質管理
- 臨界ミセル濃度測定など

### ① メリチンとカルモジュリン



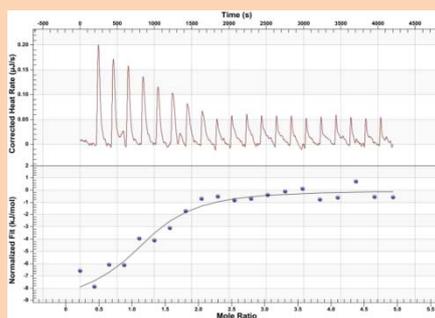
$K_d$ (mol/L)	$2.1 \times 10^{-8}$
$n$	0.8
$\Delta G$ (kJ/mol)	-43.8
$\Delta H$ (kJ/mol)	27.4
$-T\Delta S$ (kJ/mol)	-71.2



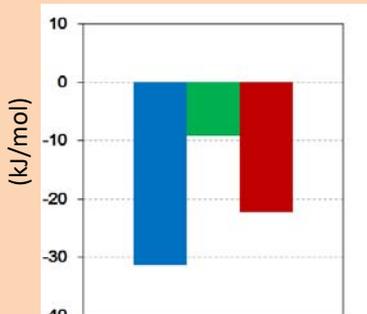
$\Delta S$ 優勢

疎水性相互作用

### ② イブプロフェンとヒト血清アルブミン

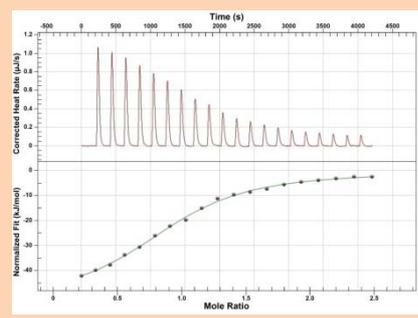


$K_d$ (mol/L)	$3.2 \times 10^{-6}$
$n$	1.2
$\Delta G$ (kJ/mol)	-31.4
$\Delta H$ (kJ/mol)	-9.2
$-T\Delta S$ (kJ/mol)	-22.2

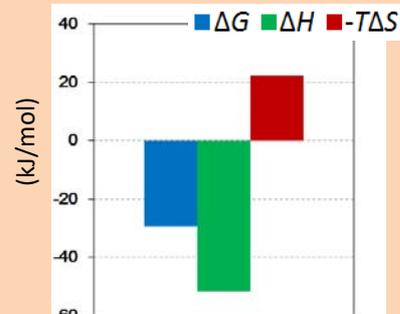


両方の寄与

### ③ トリ-N-アセチルグルコサミンとリゾチーム



$K_d$ (mol/L)	$6.5 \times 10^{-6}$
$n$	0.9
$\Delta G$ (kJ/mol)	-29.6
$\Delta H$ (kJ/mol)	-51.7
$-T\Delta S$ (kJ/mol)	22.1



$\Delta H$ 優勢

水素結合, 静電相互作用