

# InSynBio 抗体工程服务说明

版本：v1.0 | 日期：2026-02-23

## 一、服务总览（按序列与结构）

大类	服务名称	开发意义
序列	IMGT / Kabat 编号与 FR/CDR 切分	标准编号与 CDR 界定，支撑比对、突变定位、克隆设计
序列	临床抗体药物 germline 检索、VH/VL 黄金配对	追溯胚系来源，评估 VH/VL 配对合理性
序列	可开发性 / CMC 序列分析	pI、GRAVY、SAP 等，降低 CMC 失败与返工
序列	CDR 化学修饰风险扫描	脱酰胺、氧化等，指导突变设计或工艺控制
序列	InSynBio 免疫原性 In silico 评估	筛查 T 细胞表位，为降低免疫原性设计提供参考
结构	抗体 Fab / VHH 结构预测	结构是界面分析、表位推断和亲和力设计的前提
结构	抗原抗体复合物结构预测	支撑结合机制、表位定位、亲和力成熟与 binning
结构	抗体结构 13 参数评估	VH-VL 夹角、界面、CDR 构型，支撑可开发性判断
结构	抗原抗体界面解析	BSA、H 键、盐桥等，指导表位工程与竞争分析
结构	多抗体 vs 同一抗原比较	候选排序、表位 binning、竞争关系判定
结构	结构驱动亲和力成熟	基于结构的序列设计，缩短实验筛选周期
综合	AI 可开发性 / CMC 建议	整合多维评估，输出可操作的 CMC 优化建议

## 二、序列服务（Sequence）

### 2.1 编号与切分

标准编号与 CDR 界定是序列比对、突变定位、克隆设计和人源化设计的基础；确保与文献、专利和数据库一致。

- IMGT、Kabat 编号
- FR/CDR 切分与双 scheme QA

## 2.2 临床抗体药物 Germline 检索与 VH/VL 黄金配对

基于 842 条临床抗体药物数据，为抗体序列追溯胚系来源、评估 VH/VL 配对合理性，支撑工业化框架选择与可开发性预判。

- **临床抗体药物 germline 检索**：胚系身份鉴定、最近胚系、identity%（842 条临床抗体库）
- **VH/VL 黄金配对**：VH 与 VL 组合在临床抗体中的共现频率

## 2.3 可开发性 / CMC 分析

理化与可成药性指标影响制剂、纯化与稳定性；提前识别高风险位点可降低 CMC 失败和后期返工。

- pI、GRAVY、不稳定指数、净电荷
- SAP 聚集倾向（9-mer 疏水、7-mer 电荷）
- CMC 设计（pI 降低、FR-only 突变建议）

## 2.4 CDR 化学修饰风险

化学修饰可导致活性下降或异质性；早期识别可指导突变设计或工艺控制。

- 脱酰胺（NG/NS）、异构化（DG/DS）、氧化（M/W）、糖基化（NxS/T）、游离 Cys

## 2.5 InSynBio 免疫原性 In silico 评估

提前筛查潜在 T 细胞表位，为降低免疫原性设计提供参考；最终需湿实验验证。

- MHC-II 27 等位基因预测、风险位点与聚类、表面免疫原性

---

# 三、结构服务 (Structure)

## 3.1 抗体结构建模

结构是界面分析、表位推断和亲和力设计的前提；预测结构可用于虚拟筛选与优先排序。

- Fab 结构预测（VH+VL）、VHH 单域抗体
- 结构质量指标：pLDDT、ipTM、pTM

## 3.2 抗原抗体复合物结构建模

复合物结构支持结合机制、表位定位和阻断/协同分析，可指导亲和力成熟和表位 binning。

- Ab-Ag 复合物从头预测（AlphaFold2）
- 复合物质量指标（ipTM、pTM、pLDDT）

## 3.3 抗体结构 13 参数评估

结构合理性评估支撑人源化设计与可开发性判断；VH-VL 界面与 CDR 构型可指示稳定性与表达。

- VH-VL 夹角、界面接触与距离
- Vernier SASA、packing、CDR 构型、pLDDT

3.4 抗原抗体界面解析

界面指标反映结合强度与机制；paratope/epitope 可指导表位工程和竞争分析。

- BSA、Paratope / Epitope 残基
- H 键、盐桥、疏水接触、 $\pi$ - $\pi$  堆积
- 电荷互补性、SC 分数、 $\Delta G$  估计、阻断分析

3.5 多抗体 vs 同一抗原比较

支持候选抗体排序、表位 binning 与竞争关系判定，辅助组合用药与专利布局。

- Epitope 重叠度、竞争 / 非竞争关系、BSA/SC 对比

3.6 结构驱动亲和力成熟

基于 Ab-Ag 结构生成候选突变或重设计序列，提高亲和力与表位覆盖，缩短实验筛选周期。

- 设计区域可选（如 CDR-H3）、可开发性初筛

四、综合服务

4.1 AI 可开发性 / CMC 建议

整合 developability、CDR 风险、界面、免疫原性等评估结果，输出优先级排序的 CMC 风险、位点建议、可选突变方向。

五、客户类型适配

客户类型	推荐服务
转基因人源化小鼠抗体	序列：编号、胚系检索、可开发性、CDR 风险、免疫原性；结构：建模、界面解析、多抗体比较
鼠源抗体人源化	全量服务（含 Vernier、VH/VL 黄金配对、CMC 设计）
全人 / 第三方抗体评估	序列 + 结构 + 多抗体比较 + AI 建议

本说明由 InSynBio AbEngineCore 生成，供对外介绍与网站使用。