

酵素の耐熱化に関する研究

大阪大学 情報科学研究科 二井手哲平, 戸谷吉博, 清水浩

目的 任意酵素の構造安定性に影響するアミノ酸残基をRosettaソフトウェアで調査し、安定性に寄与するアミノ酸の位置や種類に関する情報を得る。

内容 ハロゲン化酵素の全てのアミノ酸残基に対して、進化的に保存性の高いアミノ酸に置換した点変異モデルを作成し、変異前後での自由エネルギー変化を評価した。

結果 244残基のアミノ酸を対象に配列保存度を元にした配列設計により、酵素全体の自由エネルギーが低下する結果を得た。これは、熱力学的に安定な酵素が設計できたことを示唆しており、進化情報を利用した酵素の耐熱化につながる成果を得た。

利用した計算機	OCTOPUS
ノード時間	2500時間
使用メモリ	3,800GB
並列化	20並列

