

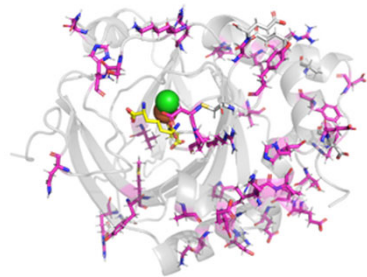
酵素の耐熱化に関する研究

大阪大学 情報科学研究科 宮脇佳汰, 二井手哲平, 戸谷吉博, 清水浩

目的 任意のハロゲン化酵素の耐熱化に関わるアミノ酸残基をタンパク質の構造シミュレーションで調査し、酵素の耐熱化を目的とした。

内容 耐熱化させたい対象酵素と構造的に相同な酵素をデータベースより収集し、安定性に寄与する変異箇所と変異アミノ酸種を決定した。この変異箇所に対して変異シミュレーションを実施した。

結果 構造シミュレーションにより効果的に構造エネルギーを低下させることに成功した。変異導入により酵素の側鎖間に新たな水素結合の形成が確認され、この水素結合が酵素の安定化に寄与していることを示す結果を得た。



利用した計算機	OCTOPUS 汎用CPUノード群	
ノード時間	2,500 時間	
使用メモリ	3,800 GB	
並列化	20ノード 並列	