

酵素の熱安定性解析に関する研究

大阪大学 情報科学研究科 二井手哲平

目的 酵素の多彩な機能を生体外で利用するために、安定性を司るアミノ酸残基を同定することは重要である。ここでは、Rosettaソフトウェアを用いた変異シミュレーションを実施することで、変異導入前後の酵素のエネルギー解析を評価した。これにより、安定性を司るアミノ酸残基を推定できる可能性がある。

内容 任意酵素の特定のアミノ酸残基に対して変異を導入し、構造安定化に寄与するアミノ酸を調査した。変異導入前後で任意酵素の自由エネルギー変化を分析した。

結果 安定性に寄与するアミノ酸残基にある程度法則性があることを見出した。実験的にこの変異が熱耐性を向上させることが明らかとなった。これにより、熱力学的に安定な酵素を設計する指針となる知見を得た。

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

