

大規模生体分子化学計算による酵素の反応解析や選択性予測への挑戦

岡山理科大学シミュレーション科学専攻 自然科学研究所 直島好伸、矢城陽一朗、守屋陽輔
甲南化工株式会社

Keywords: シミュレーション・生体分子・機能物質・生体触媒・有機合成

1. 研究目的

我々のグループは、以前から環境に優しい酵素リパーゼを用いて、有機化合物の右手型と左手型をつくりわける実験を行い、その選択性を経験的に予測してきた。本研究は、次世代ものづくり・新機能物質の創成に関する研究の一環として、従来の有機合成や生体触媒による実験や経験に加えて、大規模生体分子化学計算により、酵素リパーゼの反応や選択性を非経験的に解析・予測することを目的としている。

2. 酵素と有機化合物の複合体の分子計算

コンピュータ上で、酵素リパーゼ (図1) と有機化合物 (図2) の複合体を構築し、分子化学計算ソフトAMBERを用いた分子動力学計算や、生体分子量子化学計算ソフトABINIT-MP/BioStationを用いたフラグメント分子軌道計算を行った。それらの分子計算の結果から、

酵素リパーゼと有機化合物の原子間距離や、結合エネルギーを算出、解析することによって、酵素リパーゼの化合物に対する選択性や、その大きさの程度が非経験的に予測できる結果を得た。さらに、精度を上げた分子計算シミュレーションを行うことで、有機反応経路や有機化合物の機能解明を目指している。

3. 応用の可能性

このような酵素に対する生体分子計算と酵素を用いる有機合成の融合は、ものづくりの加速や効率化だけでなく、有害金属廃棄物を出さないという点で環境に優しく、さらに、コスト的な面においても、従来の実験のみの方法に比べ、高い優位性を誇っている。また、本研究のような大規模生体分子化学計算は、化学分野にとどまらず、創薬、食品、香料、ナノテクノロジーなど、多岐にわたる分野に広がっている。

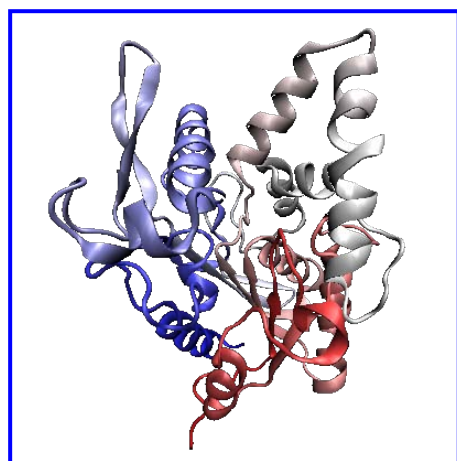


図1 酵素リパーゼ

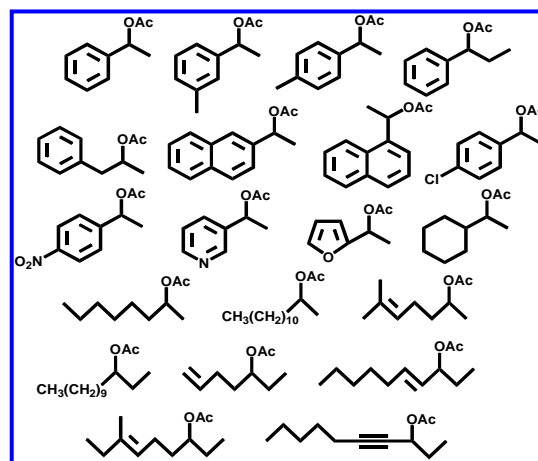


図2 有機化合物

本研究は、日本コンピュータ化学会 2011 春季年会&10周年記念シンポジウムにおいて SCCJ特別奨学賞を受賞した。

「酵素リパーゼの鏡像体選択性に関する大規模生体分子化学計算」

守屋陽輔, 矢城陽一朗, 今川敦, 木村崇知, 亀澤誠, 直島好伸 (岡山理大院, 甲南化工)

連絡先 直島好伸研究室 TEL 086-256-9639 E-mail naoshima@sp.ous.ac.jp
甲南化工(株) TEL 072-674-0612 E-mail konan_ch@tcn.zaq.ne.jp
http://www.konankako.co.jp 担当 木村崇知・亀澤 誠