

環境とバイオテクノロジー
2022 年度採択研究代表者

2022 年度
年次報告書

小野田 浩宜

名古屋大学 シンクロトロン光研究センター
助教

構造予測 AI が見出すバイオ燃料変換酵素

研究成果の概要

本研究では、CYP152 脂肪酸ペルオキシゲナーゼの予測構造と分子動力学シミュレーション (MD 計算) を用いて、微生物が生産する脂肪酸をガソリン主成分である炭素数 7~9 の炭化水素に変換し、バイオガソリンを生産する系の確立に取り組んでいる。

2022 度は AlphaFold のタンパク質予測構造を MD 計算するための前処理過程として、予測構造のヘム活性種 Compound I に結合するシステインを原点に移動し、P450 の結晶構造のヘムを揃えたときに相対配置が換わらない保存されたアミノ酸を利用して、ヘム近傍アライメントを行うプログラムを作成した。ヘム活性種を内包した構造ファイルを生成し、続けて点電荷を自動で入力するプログラムを作成した。また、非階層的なクラスタリングを用い MD 計算を行う酵素の優先順位を決定するプログラムを構築した。最終的に得られた前処理済みの構造情報を用いて MD 計算を実施し、予測構造に最適化された MD 計算条件の再設計を実施した。その結果、先行研究である結晶構造と MD 計算を用いた活性予測と同程度のスコアで、CYP152A1、B1、N1 活性の再現に成功した。今後は脂肪酸初期配置の最適化、脂肪酸鎖長依存的な活性の再検討を行い、結晶構造未知、触媒活性未知の CYP152 酵素の活性予測を目指す。