

# 分子シミュレーションを用いた基質を含む酵素活性中心の動的解析

○佐々和洋<sup>1</sup>、宇野健<sup>2</sup>、林治尚<sup>3</sup>、中野英彦<sup>1</sup>

<sup>1</sup>兵庫県立大・工 (〒671-2201 兵庫県姫路市書写 2167)

<sup>2</sup>広島県立大・経営 (〒727-0023 広島県庄原市七塚町 682)

<sup>3</sup>兵庫県立大・学術総合情報センター (〒671-2201 兵庫県姫路市書写 2167)

## 【緒言】

近年、ナイロンやビニール袋・ペットボトルなど、自然には分解が困難な合成繊維の処理に関する研究は重要な課題の一つである。根来らは、酵素による合成繊維の分解を目的とし、6-アミノカプロン酸の2量体(6-aminohexanoate-linear-dimer) (Ald) の分解酵素である Hyb24 と Hyb24DN の活性中心の内2残基を置換した Hyb24DN を比較して、Hyb24DN が Hyb24 の約170倍の活性を示すことを明らかにした。しかし、活性中心のリガンド・レセプターの構造や挙動、水の配向などの詳細な情報は明らかになっていない。そこで、生体高分子のシミュレーションに適した AMBER ver7.0 を用いて、水中における酵素の安定や活性部位の挙動、および Ald が挿入されたことによる活性部位の状態の変化に対する解析を試みた。

## 【方法】

シミュレーションには AMBER ver.7 を使用し、Force Field には parm94 force field を用いた。モデリングは、AMBER のモジュールの一つである xleap を使用し、目的酵素の PDB ファイルより作成した。ただし、基質を含む場合は、AMBER のデータベースに Ald が残基として登録されていない。そこで、PREP モジュールを用いて登録をおこなった。また、すべてのシミュレーションにおいて、酵素の周囲に水分子を配置し水溶液環境下とした。分子動力学計算は、AMBER の sander モジュールを使用し、極小化を行った後、分子動力学計算をおこなった。

## 【結果】

Ald を含まない場合、酵素の活性部位において、NMR により観測されたような水素結合ネットワークが見受けられた (Figure 1(a))。また、Ald を含む場合は、Ald の末端が D181 に隣接し、分解反応が起こる部分が S112 付近に存在している様子がうかがえた (Figure 1.(b))。Ald や活性部位の挙動など詳細については、ポスターにて報告する。

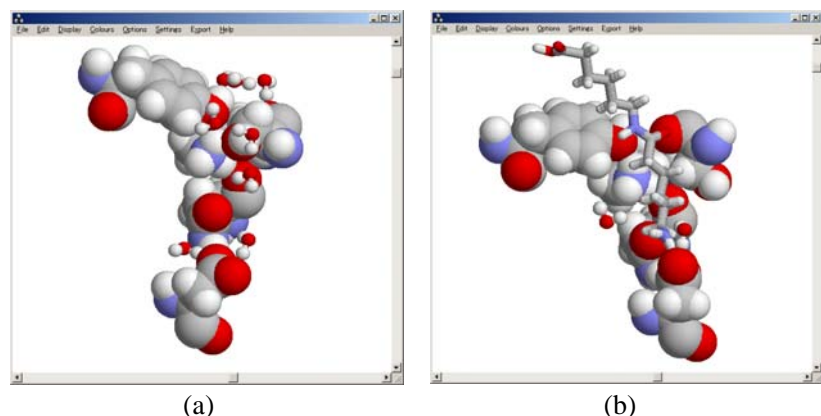


Figure 1. Ald を含まない活性部位(a)および Ald を含む活性部位 (b)の極小化構造