

2023 年度年次報告書
環境とバイオテクノロジー
2022 年度採択研究代表者

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 程度の炭化水素に変換し、バイオガソリンを生産するシステムの確立に取り組んでいる。

2023 年度は昨年度までに構築した脂肪酸酸化位置の推定環境を用いて、脂肪酸の酸化活性が未報告の酵素の *in silico* スクリーニングを実施した。炭素数 14、12、10 の直鎖アルキル脂肪酸の一次スクリーニングの結果から、炭素数 10 の脂肪酸の β -位を酸化する可能性があるクラスターを限定した。二次スクリーニングを行い、炭素数 14 では脂肪酸の短縮反応が期待される α -位を優先的に酸化し、炭素数 10 では末端オレフィン化反応が期待される β -位を優先的に酸化する酵素を 2 つ選抜した。一次スクリーニングの酵素と選抜した酵素の発現系を構築し、大腸菌内での発現を確認した。しかし、ヘムを内包して精製できた酵素は一次スクリーニング由来の 3 種のみであった。この 3 種の酵素の触媒活性は *in silico* の予測と一致し、 α -位を優先的に酸化した。二次スクリーニングで選抜された酵素を安定化させる変異を加え、選抜した酵素の精製に成功した。今後は、変異体の活性予測と実測を行い、変異による脂肪酸酸化活性の影響を調査する。

二次スクリーニングで選抜された酵素のホモログはすべて予測した為、「人工ホモログ酵素」を生み出すために、活性部位の形状を変化させる変異体の *in silico* 設計のシステムを立ち上げ、3 種類の人工酵素の発現を確認した。今後は *in silico* で人工酵素の設計を行い、脂肪酸の酸化反応に限らず酵素による分子の変換活性の予測を目指す。