

# Theoretical Studies on the Reactions of Diol Dehydratase by Large-Scale Quantum Chemical Calculations

井富, 一城

<https://hdl.handle.net/2324/1500681>

---

出版情報：九州大学, 2014, 博士（工学）, 課程博士  
バージョン：  
権利関係：やむを得ない事由により本文ファイル非公開（3）

氏 名	土井富 一城		
論 文 名	Theoretical Studies on the Reactions of Diol Dehydratase by Large-Scale Quantum Chemical Calculations (大規模量子化学計算を用いたジオールデヒドラターゼの反応に関する理論的研究)		
論文調査委員	主 査	九州大学	教授 吉澤 一成
	副 査	九州大学	教授 久枝 良雄
	副 査	九州大学	教授 新藤 充

### 論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

本研究は、大規模量子化学計算を用いてジオールデヒドラターゼによる 1, 2-プロパンジオールおよびグリセロールの脱水反応について分子レベルで明らかにしている。さらに、計算機上で変異型の反応機構を解析する計算ミュレーションを用いて、活性中心近傍のアミノ酸残基の置換が反応機構に与える影響について評価を行い、アミノ酸残基の機能を分子レベルで明らかにしている。また、計算ミュレーションにより予測された酵素の活性は実験値と非常によく一致しており、計算ミュレーションにより酵素の設計ができることが示されている。本研究はジオールデヒドラターゼの触媒反応機構および計算ミュレーションの有益性について重要な知見を得たものとして価値ある業績であると認める。