

「serin proteaseにおける酵素触媒反応」

講演者氏名	石田豊和
所属	京都大学理学研究科理論化学研究室
講演タイトル	「serin proteaseにおける酵素触媒反応」
講演概略	酵素反応の特異性の解析のため、実験的に最もよく調べられている酵素の一つであるserine protease(trypsin)を取りあげて、QM/MM法による電子状態計算、およびMC/MDシミュレーションを組み合わせることで反応のポテンシャルを作成し、アミドの加水分解反応におけるタンパク質環境の及ぼす影響を考察した。当日は計算科学研究センターを利用して得られた結果を中心に研究結果を報告する予定である。