



科学家首次合成非自然界存在的酶

日期：2023年05月12日 14:16 来源：科技部生物中心 【字号：大 中 小】

从头设计全新的酶需要引入活性位点和底物结合囊袋，并预测这些活性位点和底物结合囊袋在发生催化反应时生成的几何上相容的天然支架，但由于缺乏合适的蛋白质结构，以及天然蛋白质序列-结构关系的复杂性，这一设计受到了限制。

近期，来自美国华盛顿大学的科研团队在《Nature》杂志发表题为“De novo design of luciferases using deep learning”的论文，首次合成出非自然界存在的酶。科学家在文章中描述了一种基于深度学习的“family-wide hallucination”方法，利用该方法模拟生成了大量包含不同口袋形状的理想化蛋白质结构，并进一步优化序列。科学家以这些蛋白结构作为支架设计人工荧光素酶，最终获得一种小而耐热、催化效率比拟天然荧光素酶，且具有高度底物特异性的人工合成酶。该酶可选择性地催化合成荧光素底物二苯基特拉克嗪（DTZ）和2-脱氧腔肠素（h-CTZ）的氧化化学发光，其设计的关键是在活性位点将一个精氨酸胍基定位到反应过程中形成的具有高度形状互补性的结合口袋中的阴离子附近。

开发具有高度活性和特异性的生物催化剂，并在生物医学中广泛应用是计算酶设计的关键里程碑，该方法的应用可有望产生广泛的荧光素酶和其他酶。

扫一扫在手机打开当前页



打印本页

关闭窗口



版权所有：中华人民共和国科学技术部

办公地址：北京市海淀区复兴路乙15号 | 联系我们

邮政地址：北京市海淀区复兴路乙15号 | 邮政编码：100862

ICP备案序号：京ICP备05022684 | 网站标识码：bm06000001 | 建议使用IE9.0以上浏览器或兼容浏览器