

提出日：平成 28 年 5 月 19 日

平成 27 年度 大阪大学蛋白質研究所 拠点事業

## (2) 研究成果の概要

課題名	ヘム蛋白質の構造機能相関の解明に向けた網羅的理論解析		
研究代表者	氏名	鷹野優	
	所属機関名・部局名	広島市立大学大学院・情報科学研究科	
	職名	教授	
事業名 (該当の事業名の右欄に○)	<input type="radio"/>	共同研究員	
	<input type="radio"/>	国際共同研究課題	
	<input type="radio"/>	超高磁場NMR 共同利用研究課題	
	<input type="radio"/>	客員フェロー	
蛋白研受入担当教員名	中村春木 教授 (蛋白質情報科学研究室)		
<p>ヘムは鉄イオンとポルフィリンからなる補欠分子であり、ヘムタンパク質は、ヘムという同じ活性サイトをもちながら、電子伝達、物質運搬、生化学反応触媒、シグナル伝達とタンパク質の違いで異なる機能を示す (活性サイトの多機能性)。このようなヘムタンパク質の活性サイトの構造機能相関の解明は生命の本質に迫るだけでなく、新規機能性物質の創製につながる。そこで理論計算を用いた網羅的解析によるヘム蛋白質の構造機能相関の解明を目指す。</p> <p>具体的には以下に示す二課題を実施した。</p> <p>(i) ヘムタンパク質の機能解明に向けた分子シミュレーション技術の開発</p> <p>ヘムタンパク質の活性サイトの構造機能相関の解明には、分子動力学法・電子状態計算の双方で新しい分子シミュレーション技術を必要とする。そこでまずはシミュレーション技術開発に手がけ、長時間の MD シミュレーションに耐える分子力場の開発 (Takano, Kusaka, Nakamura, <i>Biophys. Physicobiol.</i> <b>2016</b>, <i>13</i>, 27-35)、タンパク質の機能解析のための QM/MM シミュレーションプログラムの開発 (Takano, Nakata, Yonezawa, Nakamura, <i>J. Comput. Chem.</i> <b>2016</b>, <i>37</i>(12), 1125-1132.)を進め、その有効性を確認した。</p> <p>(ii) ヘムタンパク質の構造機能相関の解明</p> <p>ヘムの多機能性の起源を明らかにするため、構造としてヘムの歪みを、機能として電子伝達や酸化還元反応に関わる酸化還元電位に着目し、電子状計算によるヘム単体の構造-機能相関の解明を行った。その結果、各振動モードと酸化還元電位の間に相関があることもわかった。さらに従来の研究で着目されるポルフィリン面に垂直な面外の振動モードよりも今回新たに調べたポルフィリン面内のモード由来の歪みの方が酸化還元電位に対してより敏感であることが明らかになった。</p>			

※本様式は、“拠点事業成果報告”として、拠点ホームページにて公開させていただく予定です。

※必ず A4 用紙 1 枚におさめて下さい。 ※提出期限：平成 28 年 5 月 20 日(金) ※提出の際は PDF 変換して下さい。

※提出先：大阪大学蛋白質研究所拠点プロジェクト班 E-mail: tanpakuken-kyoten@office.osaka-u.ac.jp