

| | | |
|--------|---|---|
| 氏名: | 兼松 佑典 |  |
| 所属先: | 広島大学大学院先進理工系科学研究科 | |
| Email: | ykanem@hiroshima-u.ac.jp | |
| 最終学位: | 博士 (理学) | |
| 略歴: | 2015-2017 広島市立大学大学院情報科学研究科 特任助教 2017-2020 日本学術振興会特別研究員 (PD) 2020-2020 広島大学大学院先進理工系科学研究科 研究員 2020- 広島大学大学院先進理工系科学研究科 助教 | |
| 研究分野: | 物理化学、計算化学 | |

ヘムの構造機能相関解析ウェブアプリ「PyDISH」の開発

兼松佑典^{1,2}, 近藤寛子², 鷹野優³

¹ 広島大学大学院先進理工系科学研究科

² 北見工業大学工学部

³ 広島市立大学大学院情報科学研究科

ヘムは鉄イオンとポルフィリンからなる代表的な生命金属補因子である。タンパク質との結合により多様な機能を獲得し、電子伝達、物質運搬、生化学反応触媒などの非常に広範な生命現象を担っている。例えば、真核生物の多種多様な代謝機構の多くは同一祖先由来のヘムタンパク質である cytochrome P450 (CYP) に依存して駆動することが知られている。これにちなんで CYP は”diversozyme”と呼称され、機能の可変性 (多様化可能性) 自体がヘムのアイデンティティとして目されている。近年では天然に存在しない機能をヘムタンパク質やヘムの類縁体に持たせバイオ触媒や分子性材料として活用する取り組みも盛んであるが、膨大な試行錯誤に依存しているため、ヘムの機能制御機序解明に基づく開発効率化が望まれている。

ヘムタンパク質の機能解明に向けて実験・理論の双方から精力的に研究がなされており、構造解析では 6000 件を超える (6094 件: 2022 年 9 月 21 日) ヘム蛋白質の構造が Protein Data Bank (PDB) に登録されている。我々は PDB データを活用して「生命はどのようにしてヘムに潜在する複数の機能を選び分けながら引き出しているのか」という問いに答える手段を確立することを目的として、データベース同梱の構造機能相関解析ウェブアプリ「PyDISH」を開発している。本発表では PyDISH を用いてできることに加え、量子化学計算の併用により今後実装予定の機能について紹介する。