

## P-31 山田 健太

理化学研究所 杉田理論分子科学研究室

e-mail: kenta.yamada@riken.jp

2012年 学位 博士(情報科学) 取得 名古屋大学

2012年 横浜市立大学 生命ナノシステム科学研究科 特任助手

2013年 京都大学 福井謙一記念研究センター 特推研究フェロー

2015年 理化学研究所 杉田理論分子科学研究室 特別研究員



### NOR が関わる複合体の構造安定性と機能の理論解析

一酸化窒素還元酵素(NOR)は、嫌気下で脱窒過程( $\text{NO}_3^- \rightarrow \text{NO}_2^- \rightarrow \text{NO} \rightarrow \text{N}_2\text{O} \rightarrow \text{N}_2$ )の1ステップであるNO還元反応を触媒する。緑膿菌の形質膜に存在する膜貫通型タンパク質のNORは、NO生成を担う亜硝酸還元酵素(NiR)と複合体として存在している可能性が、X線結晶構造解析によって示唆された。この複合体構造は結晶化過程に起因しないことを示すために、全原子分子動力学計算を用いて、緑膿菌のモデル生体環境におけるNiR:NOR複合体構造の安定性を議論してきた。さらに、量子化学計算によって、ヘムと非ヘム鉄を含むNOR活性部位で起こるNO還元反応( $2\text{NO} + 2\text{H}^+ + 2\text{e}^- \rightarrow \text{N}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$ )の反応機構を検討してきた。当日は、これらの計算結果の詳細を報告する。