

## 密度汎関数法による一酸化炭素結合型ミオグロビンの全電子計算

○千葉 貢治<sup>1</sup>, 岡本 正宏<sup>1</sup>, 平野 敏行<sup>2</sup>, 佐藤 文俊<sup>2</sup>

<sup>1</sup>九州大学大学院 システム生命科学府 生命情報科学講座

(〒812-8581 福岡市東区箱崎 6-10-1)

<sup>2</sup>東京大学生産技術研究所 (〒153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1)

### 【緒言】

ミオグロビンは、脊椎動物の筋肉中で酸素の貯蔵・輸送に携わるタンパク質である。世界で初めて結晶構造解析が成功裏に行われたタンパク質であり、構造・機能はじめ様々な面で詳細な研究がおこなわれている。一酸化炭素ミオグロビンは、配位子である一酸化炭素が光で容易に脱離することや、C-O 伸縮振動の同定しやすさなどから、ミオグロビンの配位子吸着状態の研究に盛んに用いられてきたが、たとえば CO 吸着構造 1 つとっても諸説あり、未だ不明な点が多い。

また、計算対象としてのミオグロビンは、1)分子サイズ 2) 金属を含む の 2 点から電子状態計算が困難な分子であり、その計算達成は挑戦的な課題といえる。我々は、一酸化炭素結合型ミオグロビンの密度汎関数法による全電子計算を実行している。本発表ではその経過を報告する。

### 【方法】

Protein Data Bank エントリ 1DWR[1]を基に欠損残基を付加、解離残基に対するカウンターイオンを配置したのち、AMBER8[2]を用いて水素付加、水分子配置、局所構造最適化を行い、計算モデル構造とした(図 1)。電子状態計算には ProteinDF/QCLO システム[3]を用い、QCLO 法[4]により段階的に計算収束を達成した。

### 【結果】

図 2 に HEME+7 残基モデルにおける SCF 過程の軌道準位変化を示す。-5eV 付近の実線が HOMO の準位である。遷移金属を含む大きな分子について QCLO 法により安定した収束が得られることが示された。詳細、進捗については当日発表する。

### 【参考文献】

- [1] K.Chu, J.Vojtchovsky, B.H.McMahon, R.M.Sweet, J.Berendzen, I.Schlichting *Nature*, **403**, 921 (2000). [2] D.A.Case et al., AMBER 8, University of California, San Francisco, (2004). [3] F.Sato, T.Yoshihiro, M.Era, H.Kashiwagi, *Chem. Phys. Lett.*, **341**, 645 (2001). [4] H. Kashiwagi, H. Iwai, K. Tokieda, M. Era, T. Sumita, T. Yoshihiro, F. Sato, *Mol. Phys.*, **101**, 81 (2003).

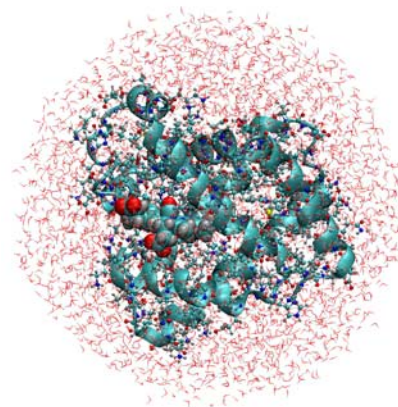


図 1:一酸化炭素ミオグロビンの計算モデル

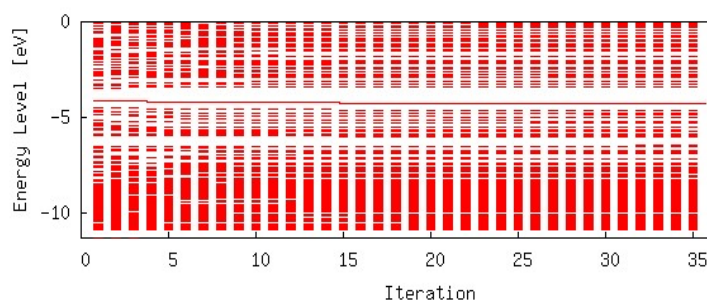


図 2 : HEME+7 残基モデルにおける SCF 過程の軌道準位変化