

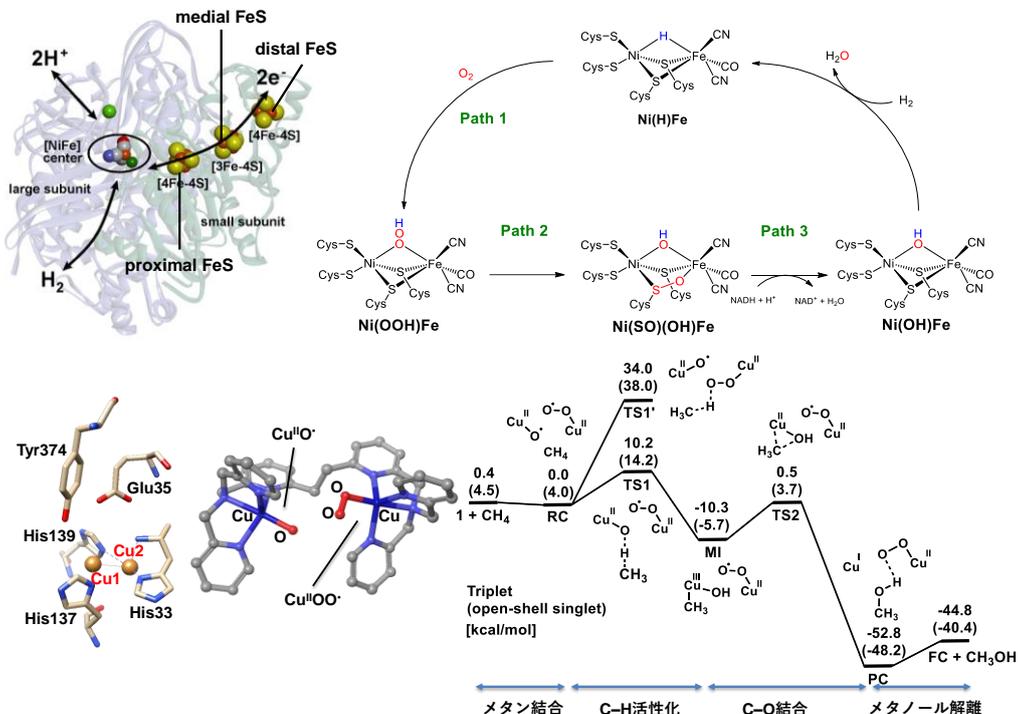
# 実験との連携による酵素触媒反応の機構解析と理論設計

堀優太 (筑波大学計算科学研究センター)  
hori@ccs.tsukuba.ac.jp

生体内タンパク質に代表される様々な酵素触媒反応は、多くの場合、活性中心に遷移金属を含む金属酵素によって触媒されている。これらの酵素触媒反応は、工業的に難しいとされる多くの反応を常温常圧で高選択的に触媒しており、これらの広範な触媒作用の発現機構が明らかになれば、環境に優しく高効率な革新的触媒の開発へつながると期待されている。

酵素触媒作用の理解には、触媒活性種の構造や電子状態、反応機構を詳細に調べることが重要であり、計算化学はその有用な手段となる。計算化学は、実験では観測が困難な遷移金属触媒の電子状態や不安定中間体、遷移状態の構造を決定することができる。特に近年の計算機性能の向上により、様々な酵素触媒反応を計算化学により取り扱うことができるようになってきている。一方で、金属酵素や金属錯体は、複雑な構造や電子状態を有することが多く、計算モデルを慎重に構築し、計算結果と実験結果が矛盾のないことを確認する必要がある。したがって、計算化学による反応解析は量子化学に関する知識のみならず、実験に対する深い理解も必要であり、理論と実験の研究協力による総合的な解析が重要となる。また、理論計算の知見を利用して触媒設計に応用するためには、理論と実験が密接に連携し、理論計算が適用可能な事例を増やしていくことが望まれる。

本講演では、酵素触媒反応を理解するために、水素分子の可逆的な酸化還元反応を触媒する酵素（ヒドロゲナーゼ）とメタンを水酸化する酵素（メタンモノオキシゲナーゼ）に注目し、計算化学を使用して実験との連携によって得られた知見や理論計算から触媒設計への展開例について紹介する。



[1] T. Hiromoto, K. Nishikawa, S. Inoue, H. Ogata, Y. Hori, *et al.*, *Chem. Sci.*, *in press*.

[2] Y. Hori, Y. Shiota, T. Tsuji, M. Kodera, K. Yoshizawa, *Inorg. Chem.* **57**, 8 (2018).