

## 大洞 光司（おおほら こうじ）

【研究課題名】 柔らかなタンパク質反応場の論理設計に基づく高活性な金属酵素の開発



大阪大学 工学研究科 助教

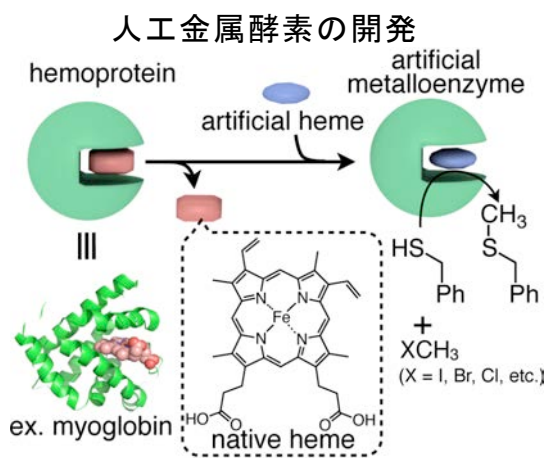
【E-mail】 oohora@chem.eng.osaka-u.ac.jp

【専門】 生物無機化学

【キーワード】 人工金属酵素、ポルフィリン化学、生物有機金属分子動力学計算

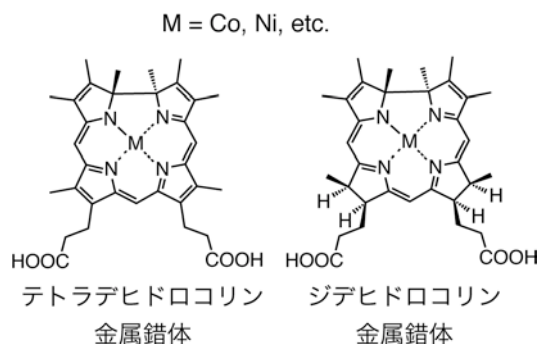
柔らかな反応場であるタンパク質マトリクスと高活性な金属錯体から構成される人工金属酵素について、実験化学および計算化学の双方から開発をめざします。特にビタミン B12 含有酵素が触媒する類似反応に焦点を当て、その論理的設計のための手法開拓に挑みます。

## 〈研究グループアクティビティー〉



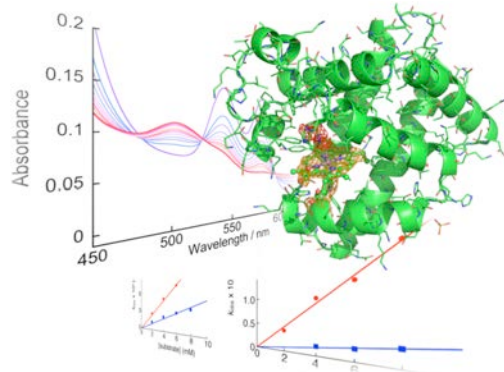
補因子置換法による機能改変・向上

## 人工金属酵素活性中心の錯体化学



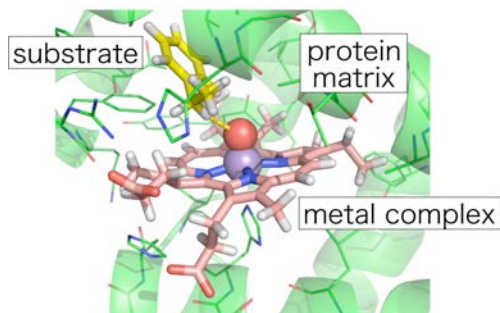
人工へムとしての新規へム類縁体の合成と物性評価

## 金属酵素の構造および反応性評価



各種分光測定、結晶構造解析などにより詳細に評価

## タンパク質マトリクスの支援による高活性化



分子動力学法を用いた論理的設計  
簡便なスクリーニング法の確立

## Koji Oohora

【Research Subject】 Construction of Highly-Active Artificial Metalloenzymes with Soft Protein Matrices by Rational Design



**Assistant Professor**

**Graduate School of Engineering, Osaka University**

【E-mail】 oohora@chem.eng.osaka-u.ac.jp

【Speciality】 Biological Inorganic Chemistry

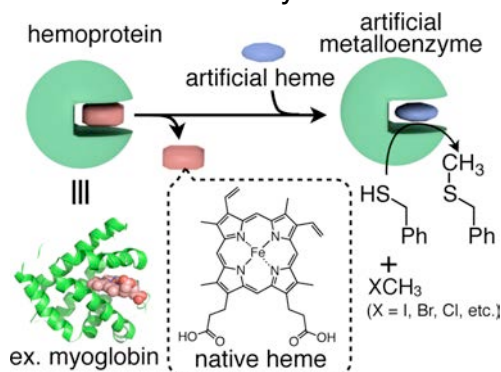
【Keywords】 Artificial Metalloenzyme, Porphyrin Chemistry,

Bioorganometallic Chemistry, Molecular Dynamics

Soft protein matrices will provide suitable reaction fields for catalysts. We will rationally develop artificial enzymes catalyzing vitamin B12-dependent enzymes-like reactions by the design with molecular dynamics.

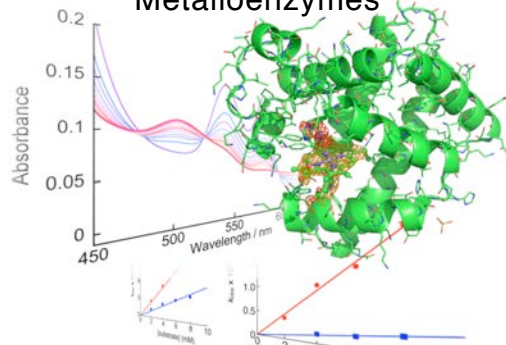
### Research Group Activity

#### Construction of Artificial Metalloenzymes



Functional conversion or improvement by the cofactor-substitution method

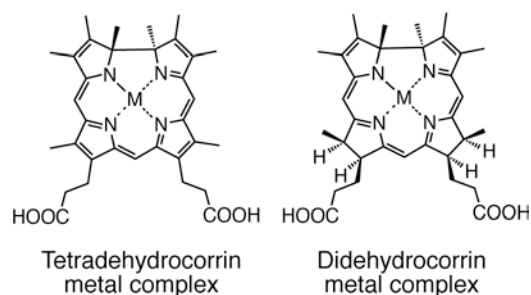
#### Structures and Reactivities of Metalloenzymes



Evaluation by spectroscopic and crystallographic methods

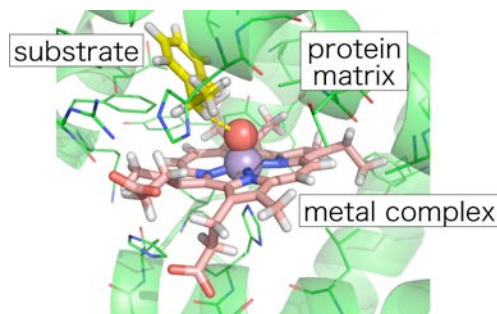
#### Coordination Chemistry of Metal Complexes in Protein Matrix

M = Co, Ni, etc.



Syntheses and characterizations of novel heme derivatives

#### High-Activity Induced by Protein Matrices



Rational design by molecular dynamics  
Development of the screening method