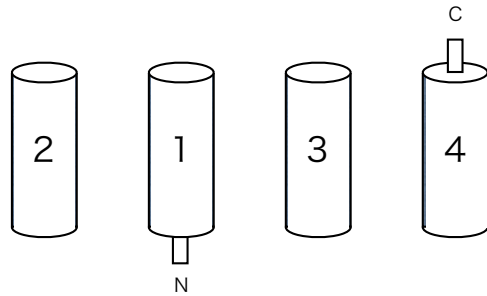


レポート課題

フェリチン(PDB ID:1FHA)の構造を、PDBjまたはRasMolで観察して、下記の4本ヘリックス束部分のトポロジーモデルをFig.3-7のような図に完成させよ。(数字はN末側からのヘリックスの順番)



生体高分子構造論

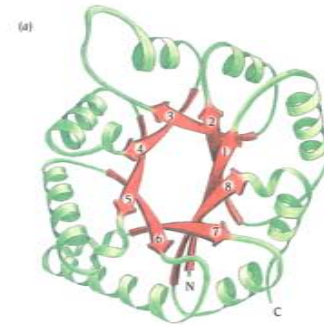
α/β 構造

α/β 構造

1. α/β バレル
(TIMバレル)
2. ねじれたオープン・シート
(ロスマンフォールド)
3. ロイシン・リッチ・モチーフ
(LRR)

1. α/β バレル

(TIM バレル)



8本の平行 β ストランド
からなる閉じたバレル
と外側の α ヘリックス

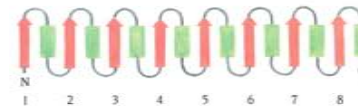
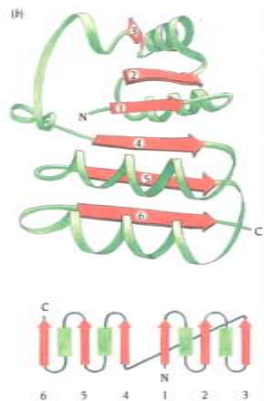


Fig. 4-1

2. ねじれたオープン・フォールド (ロスマンフォールド)



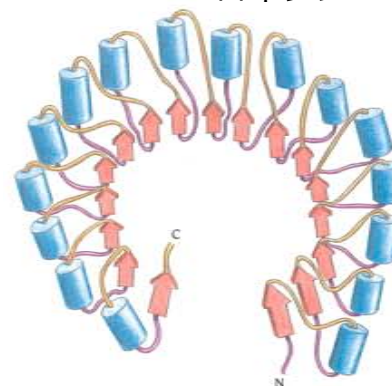
ねじれた平行 β シートと
シート両面の α ヘリックス

構造の多様性大
 β ストランド数 4~10本

Fig. 4-1

3. ロイシン・リッチ・モチーフ

ロイシン・リッチ・リピート(LRR)



蹄鉄型構造



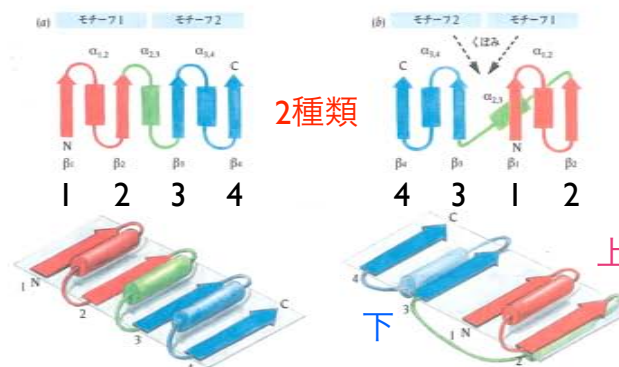
Fig. 4-11

α/β 構造に共通する特質

- (1) β - α - β モチーフからなる
- (2) ドメイン構造の中で1番多い
- (3) ループ領域に基質を結合するくぼみがある

β - α - β モチーフの繋がり方

4本ストランドの平行 β シートの場合



β - α - β モチーフは「右巻き」

Fig. 4-2

I. α/β バレル

(TIMバレル)

α/β バレル

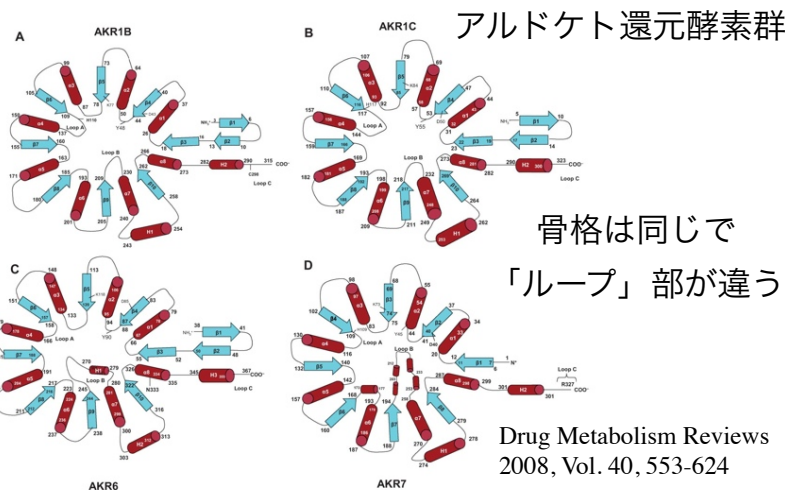
(TIMバレル)



ニワトリ
トリオースリン酸異性化酵素

PDB ID: 8TIM

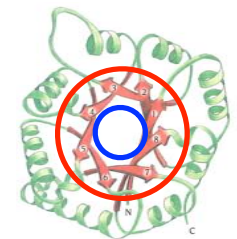
TIMバレルは種々の酵素に存在



α/β バレル内側の疎水性コア

ニワトリのトリオースリン酸異性化酵素

ストランド	1	2	3	4	5
1	Phe	Val	Gly	Gly	Asn
2	Glu	Val	Val	Cys	Gly
3	Gly	Val	Ala	Ala	Gln
4	Trp	Val	Ile	Leu	Gly
5	Gly	Val	Ile	Ala	Cys
6	Lys	Val	Val	Leu	Ala
7	Arg	Ile	Ile	Tyr	Gly
8	Gly	Phe	Leu	Val	Gly



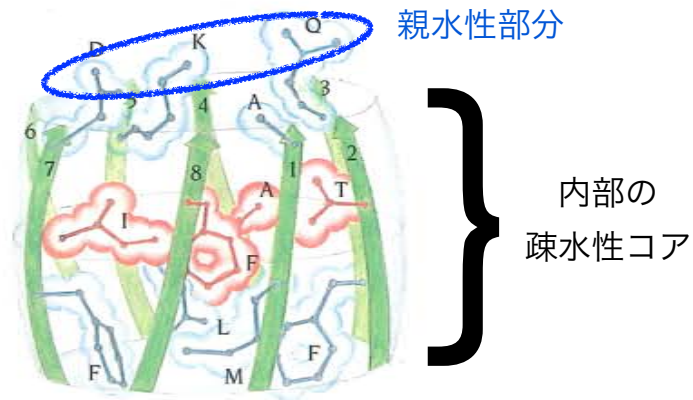
分岐した疎水性残基が

V, L, I で40%

β シートと α ヘリックスを密着させる

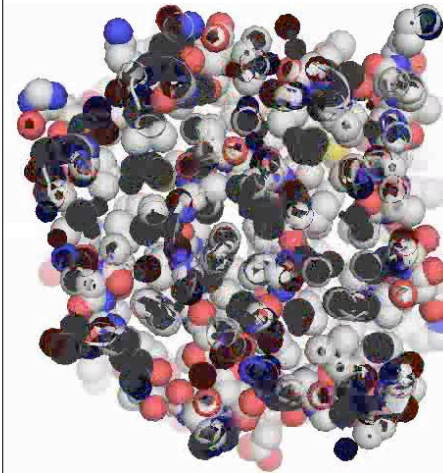
Table. 4-1

α/βバレル内側の疎水性コア



グリコール酸酸化酵素のコアの充填 Fig. 4-3

トリオースリン酸異性化酵素の8Åの輪切りのムービー



TIMバレルの場合
内側は密に詰まっている

βバレルの内側に空間のある例外

メチルマロニル補酵素Aムターゼ

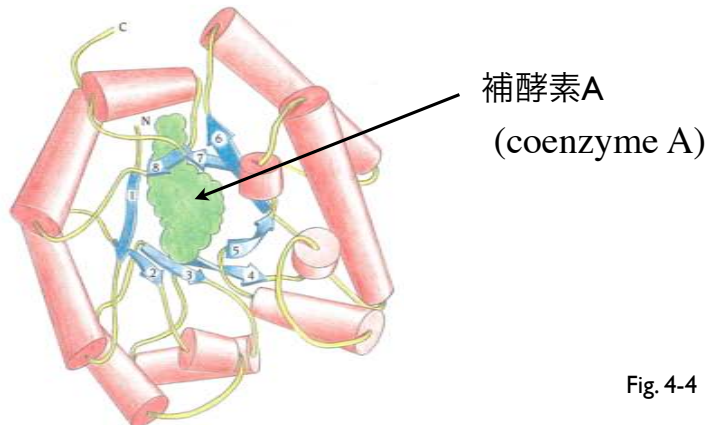
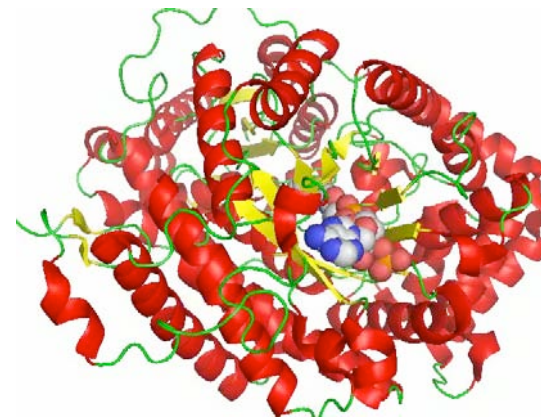


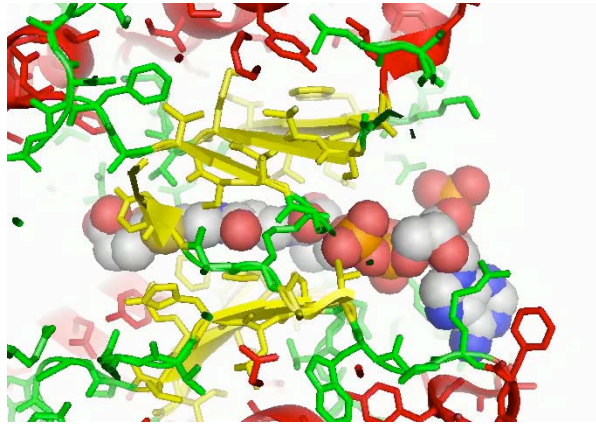
Fig. 4-4

メチルマロニル補酵素Aムターゼ



PDB ID: 4REQ

メチルマロニル補酵素Aムターゼ



βバレルの中に補酵素Aがスッポリと収まっている

α/βバレルが分子の一部のもの

ピルビン酸キナーゼ

α/βバレル
ドメイン

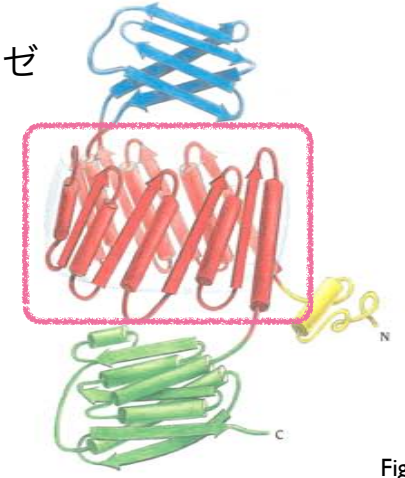
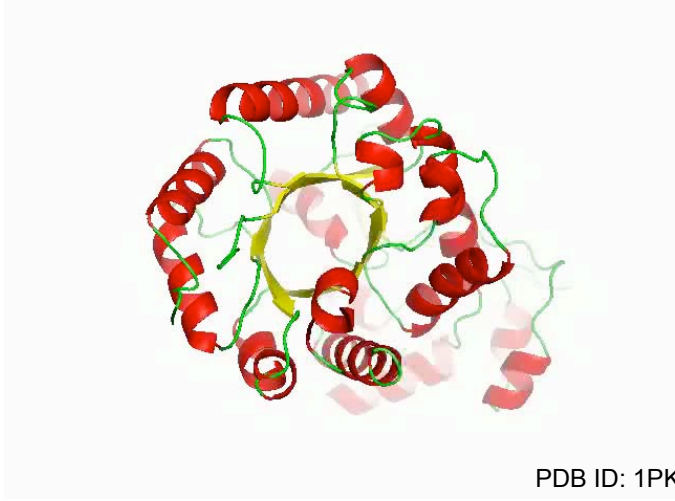


Fig. 4-5

ネコ ピルビン酸キナーゼ



PDB ID: 1PKM

バレルが2つ繋がった酵素もある

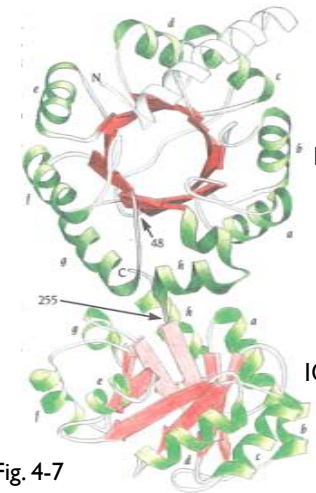


Fig. 4-7

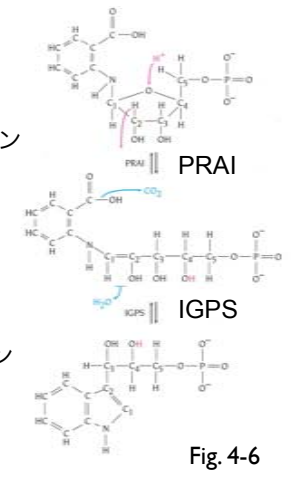


Fig. 4-6

α/β バレルと活性部位 (TIMバレル)

α/β バレル酵素の活性部位



Fig. 4-8

リブローズビスリン酸カルボキシラーゼ RuBisCoの活性部位

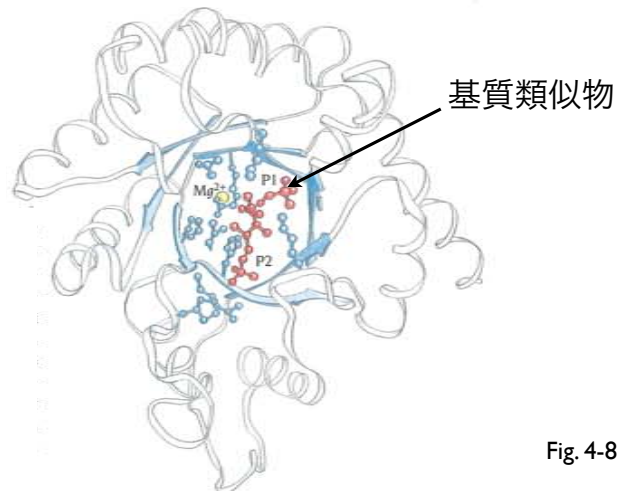
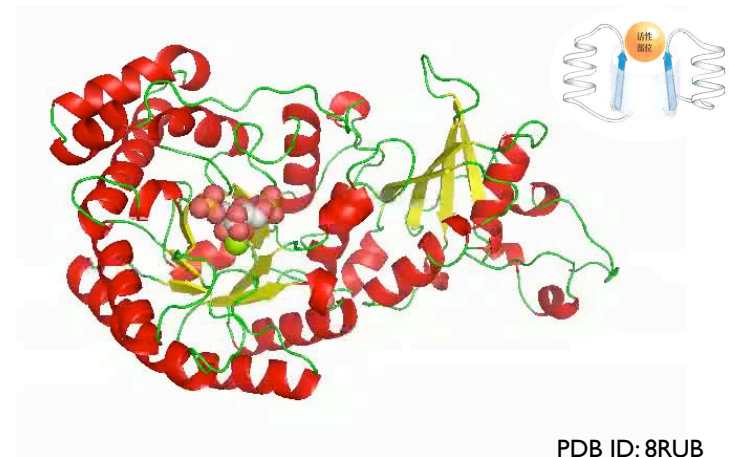
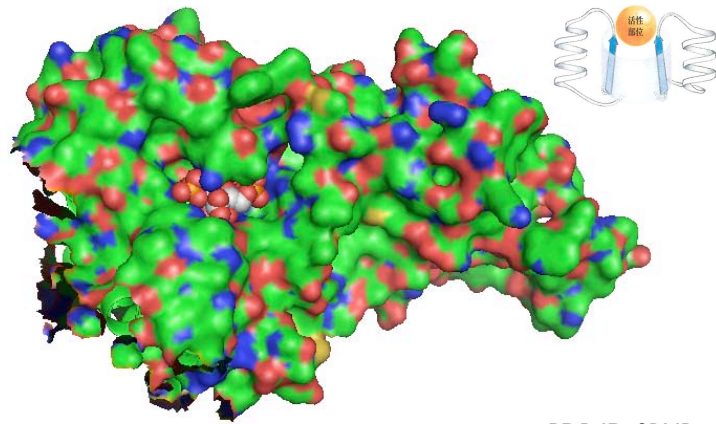


Fig. 4-8

RuBisCoの実際

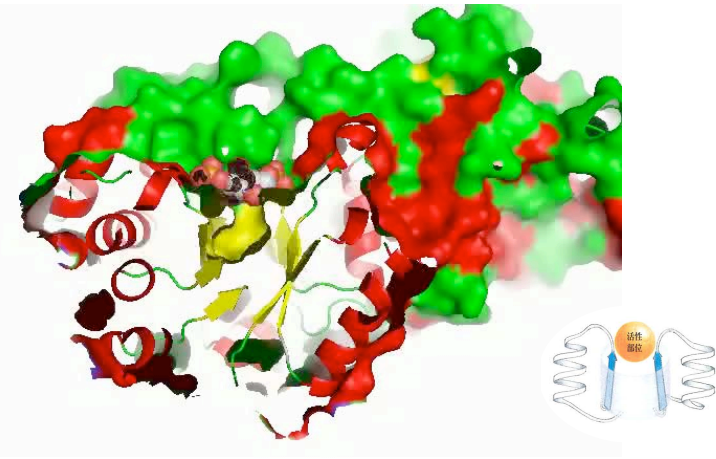


RuBisCoの実際



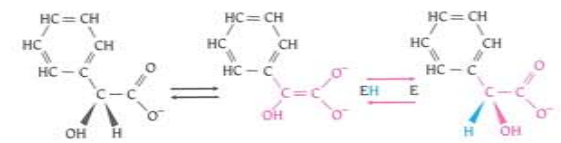
PDB ID: 8RUB

RuBisCoの実際



α/β バレル酵素の分子進化 (TIMバレル)

マンデル酸ラセミ化酵素



ムコン酸ラクトン化酵素

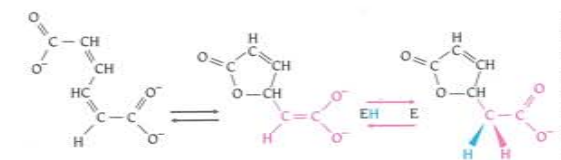
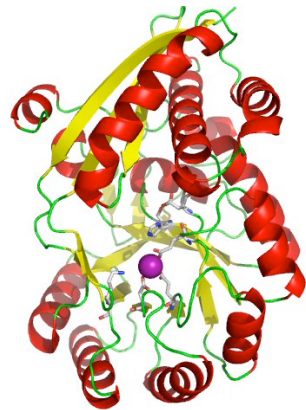


Fig. 4-9

マンデル酸ラセミ化酵素

PDB ID: 2mnr



ムコン酸ラクトン化酵素

PDB ID: 1muc

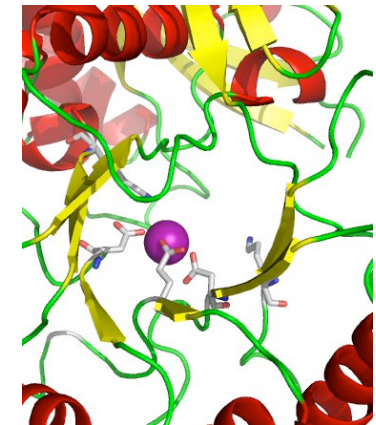
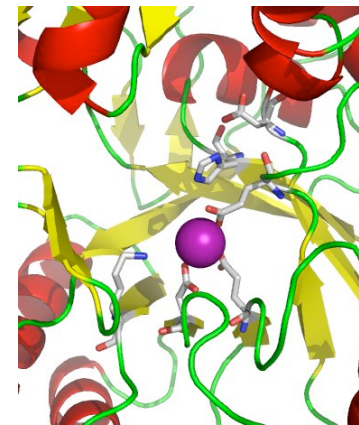


一次構造の類似性 約26%

マンデル酸ラセミ化酵素

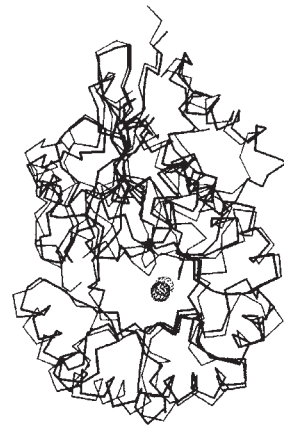
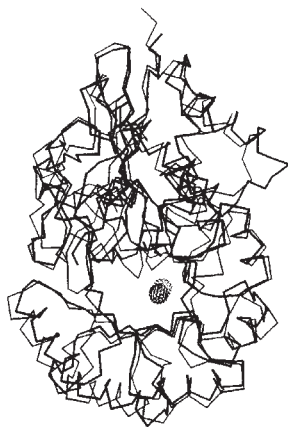
ムコン酸ラクトン化酵素

活性部位の拡大図



太線：マンデル酸ラセミ化酵素

細線：ムコン酸ラクトン化酵素

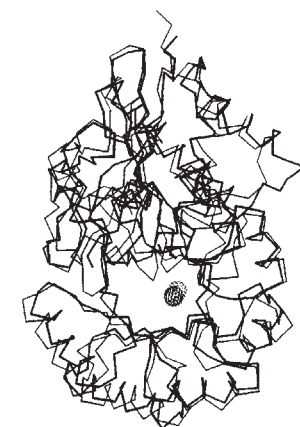


平行法

Nature 347 (1990) 692-694

太線：マンデル酸ラセミ化酵素

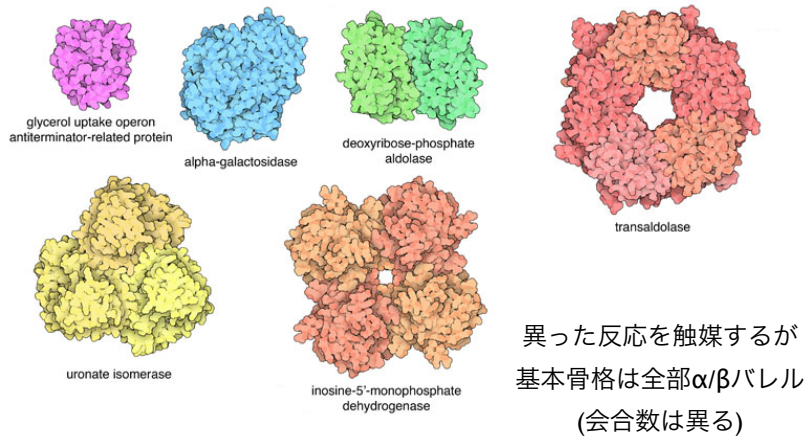
細線：ムコン酸ラクトン化酵素



交差法

Nature 347 (1990) 692-694

Thermatoga maritima の α/β バレル酵素



Science 325: 1544-1549 (2009).

2. ねじれたオープン・シート

(ロスマン・フォールド)

多様なトポロジー

ねじれたオープン・シートの例

(ロスマン・フォールド)



Staphylococcus epidermidis
脱炭酸酵素

PDB ID: 1G59

ねじれたオープン・シートの構造と活性部位

β ストランドのC端側

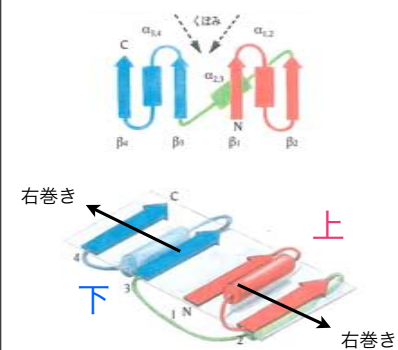


Fig. 4-2

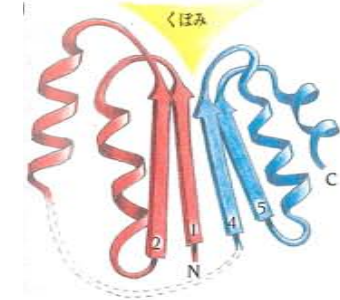
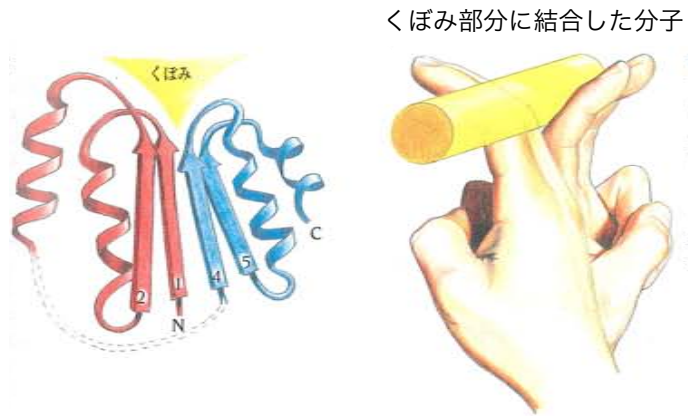


Fig. 4-13

ねじれたオープン・シートの構造と活性部位

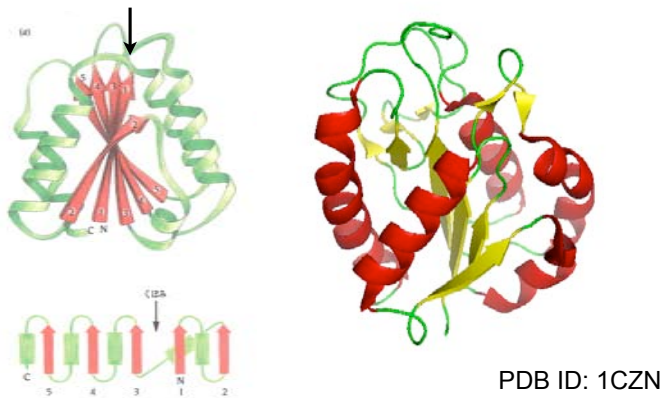


ねじれたオープン・シートの例

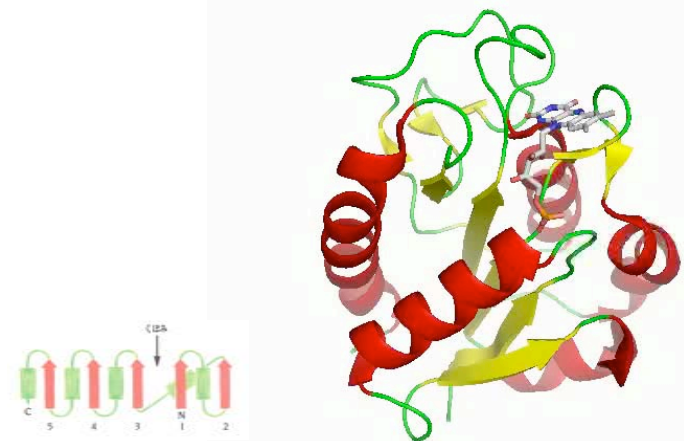
と、活性部位

“トポロジー転換点”で活性部位が
予測できる

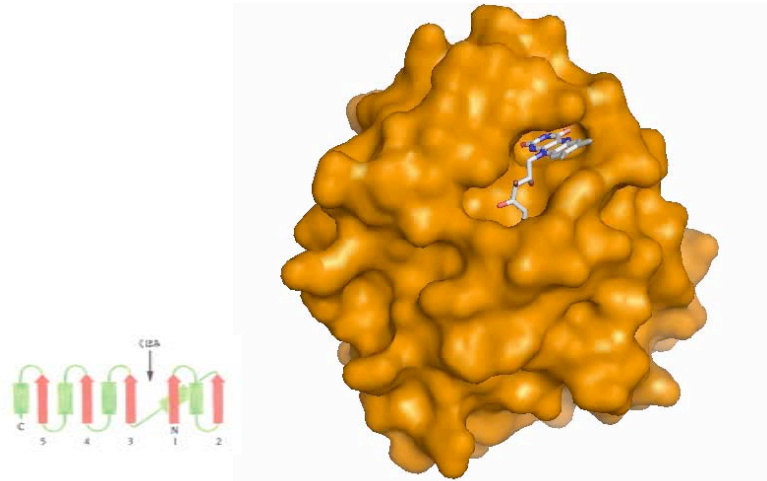
フラボドキシシン



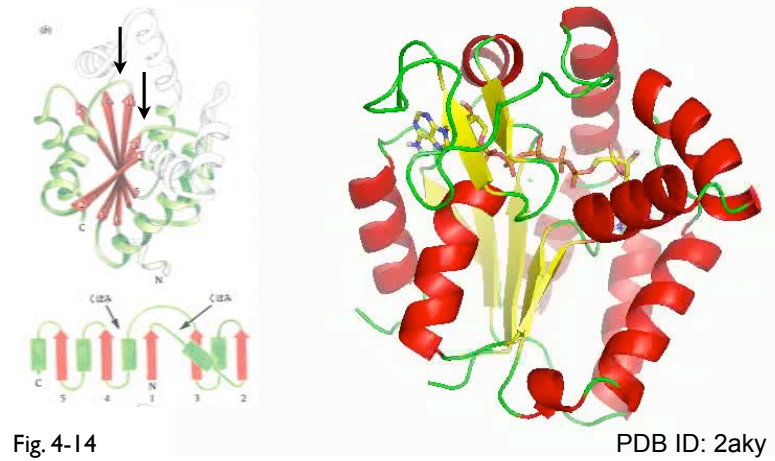
フラボドキシシン



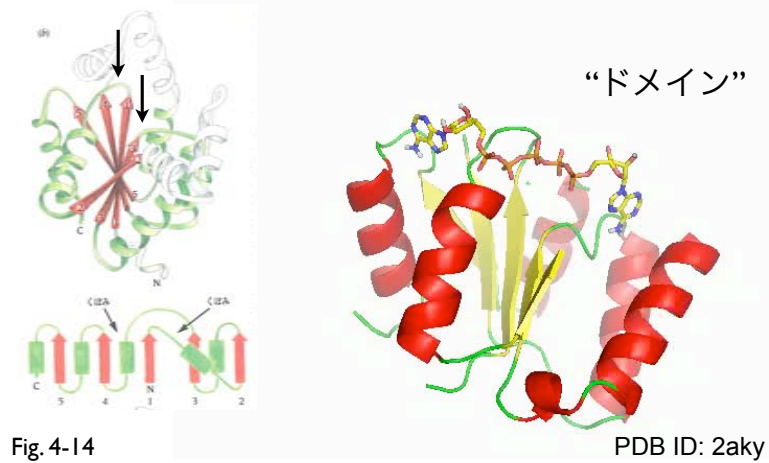
フラボドキシシン



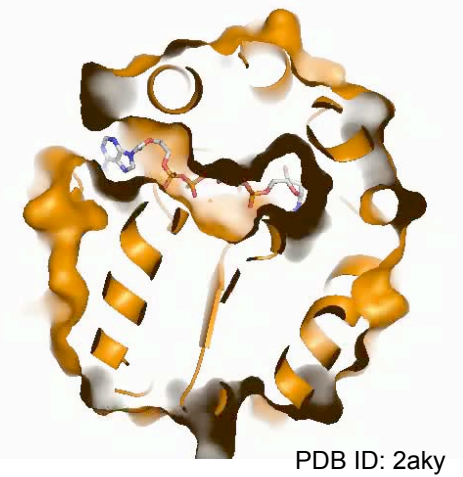
アデニル酸キナーゼ



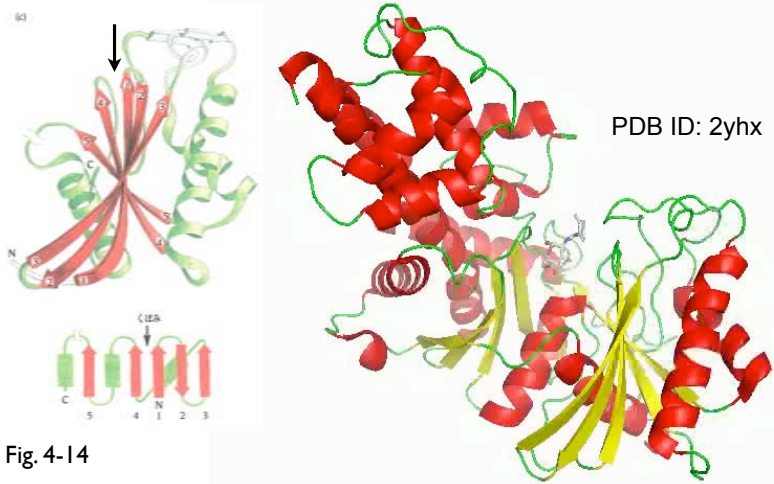
アデニル酸キナーゼ



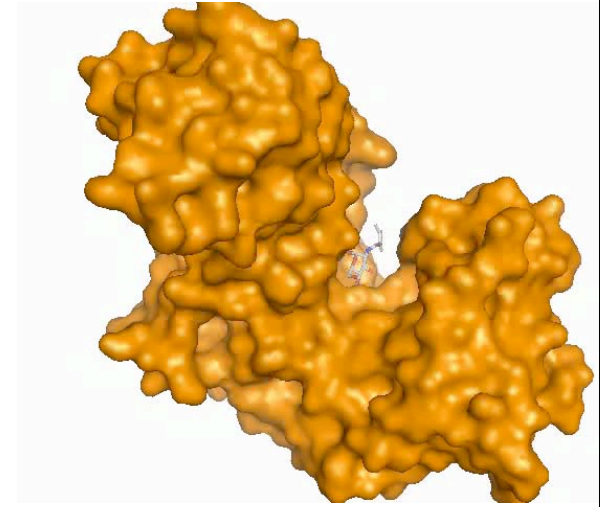
アデニル酸キナーゼ



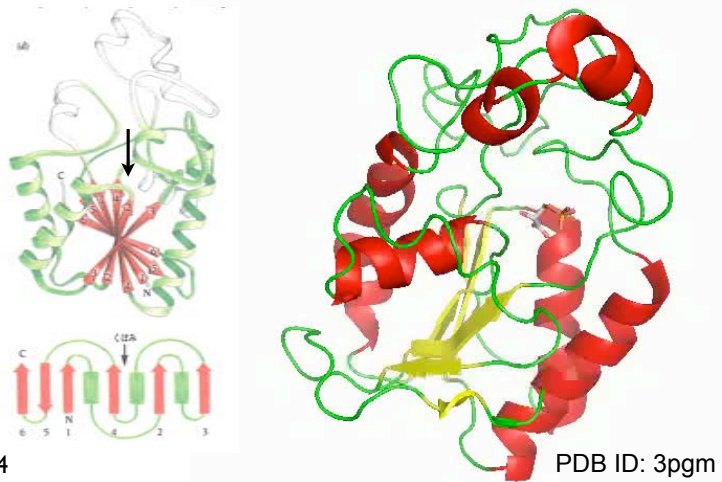
ヘキソキナーゼATP結合ドメイン



ヘキソキナーゼATP結合ドメイン



ホスホグリセリン酸ムターゼ



ホスホグリセリン酸ムターゼ

