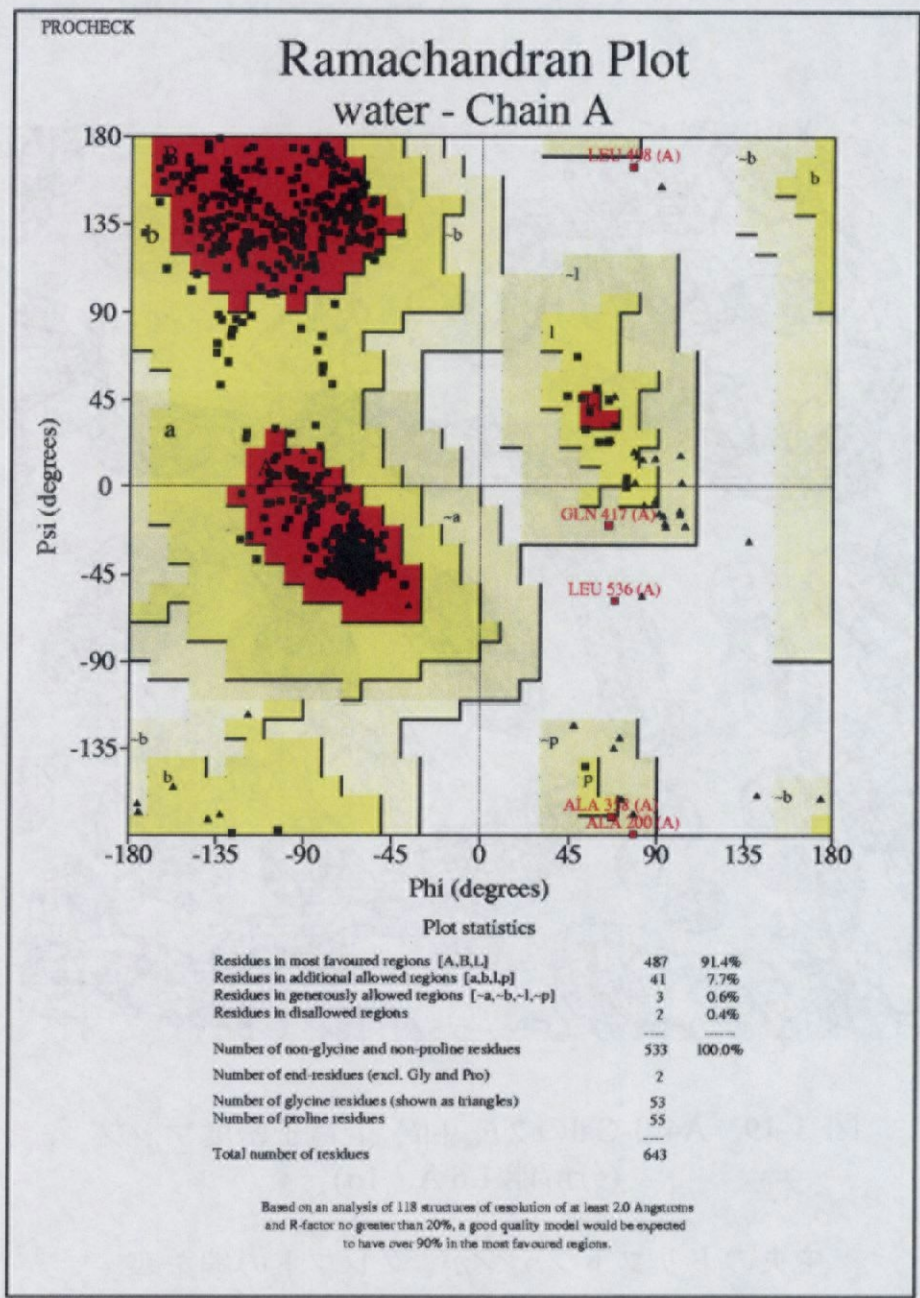


図 1-19 A4-β-Galの  $2|F_{\text{obs}}| - |F_{\text{calc}}|$  電子密度マップ  
(分解能 1.6 Å、 $1\sigma$ )

中央のトリプトファンが、クレフトの端を塞ぎガラクトース認識残基として働く隣のサブユニットの Trp182 (1-16 節)





water\_01.ps

☒ 1-20 ラマチャンドランプロット

(a)

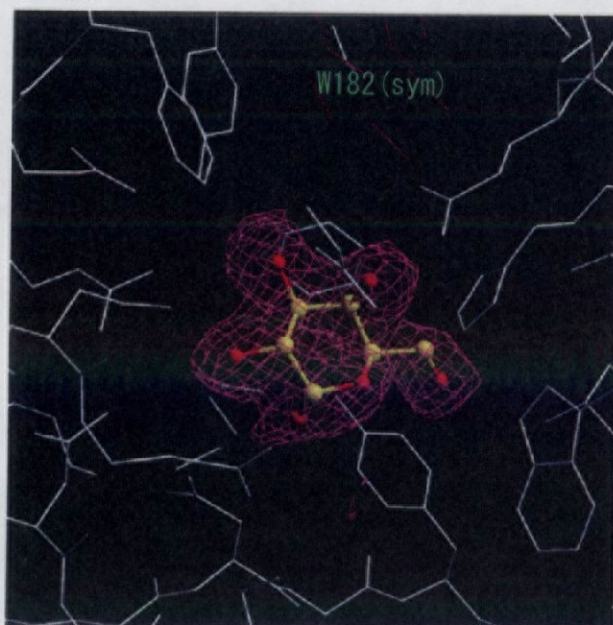


図 1-21a ガラクトースの $|F_{obs}| - |F_{calc}|$ 電子密度マップ( $3\sigma$ )。ガラクトースと相互作用を形成する隣のサブユニットのTrp182を表示した。

(b)

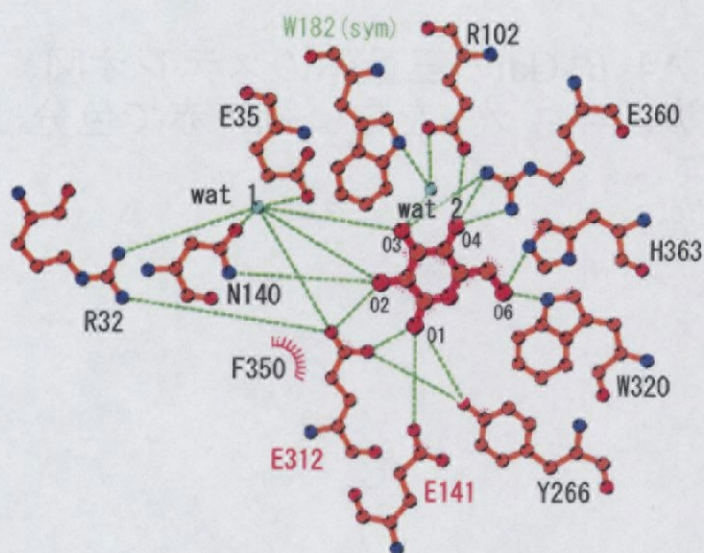


図 1-21b ガラクトースの認識残基。触媒残基のGlu141、Glu312を赤、隣のサブユニットのTrp182を緑でラベルした。水素結合を緑の破線で表した。



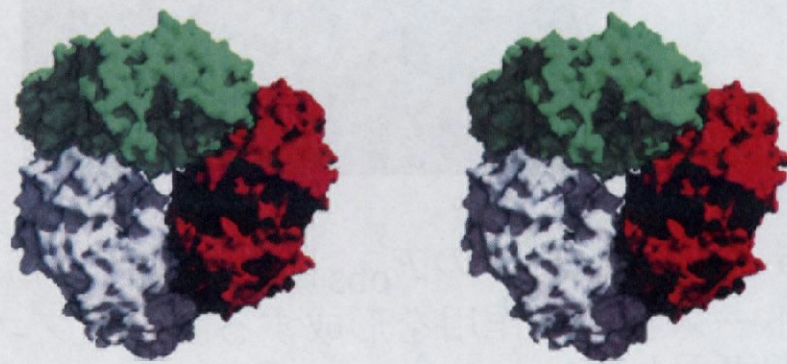


図 1-22 A4- $\beta$ -Galの三量体のステレオ図。  
各サブユニットを白、緑、赤で色分けした。



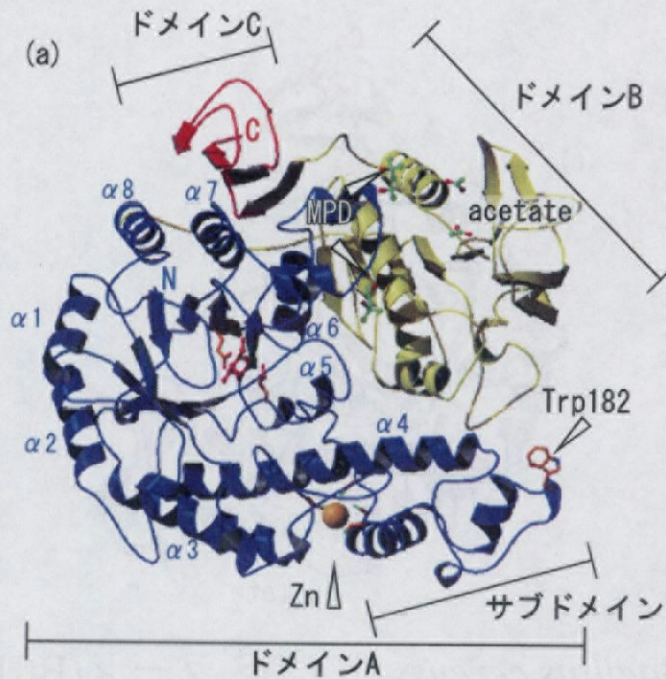


図 1-23a A4- $\beta$ -Galの単量体構造。ドメインAを青色、Bを黄色、Cを赤色で表した。結合したガラクトース、触媒残基 Glu141、Glu312、サブユニット境界のTrp182を表示した。また結合した酢酸分子、MPD、亜鉛を表示した。

(b)

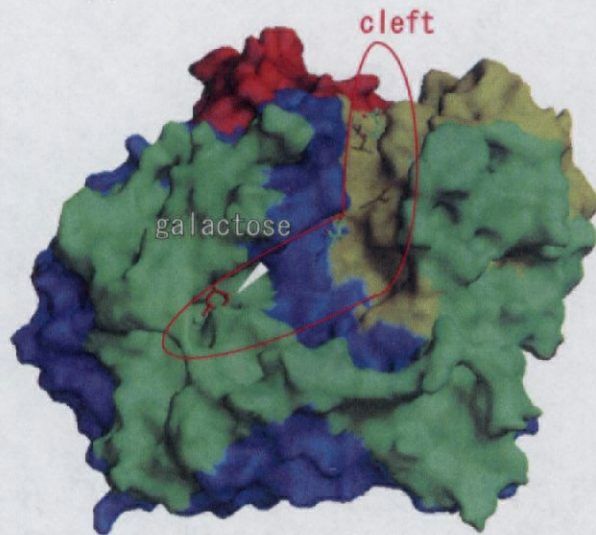


図 1-23b A4- $\beta$ -Galの単量体の表面。ドメインAを青色、Bを黄色、Cを赤色で表した。サブユニットの接触面を緑色で表した。ドメインの境界はクレフトを形成している。



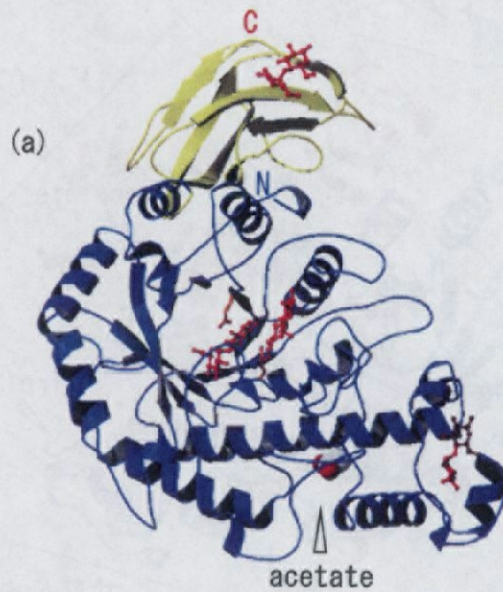


図 1-24a *Bacillus cereus*  $\beta$ -アミラーゼ(BCB)の構造。TIMバレルフォールドドメインを青色、スターチ結合ドメインを黄色で表した。触媒残基のGlu172、Glu367、結合した酢酸、マルトースを表示した。

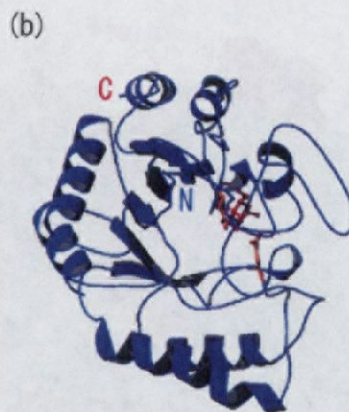


図 1-24b 大腸菌  $\beta$ -ガラクトシダーゼ(EC- $\beta$ -Gal)のTIMバレルフォールドドメインの構造。EC- $\beta$ -Galは5つのドメインからなり、TIMバレルフォールドドメインは3番目のドメイン(残基番号350-625)。触媒残基のGlu461、Glu537を表示した。



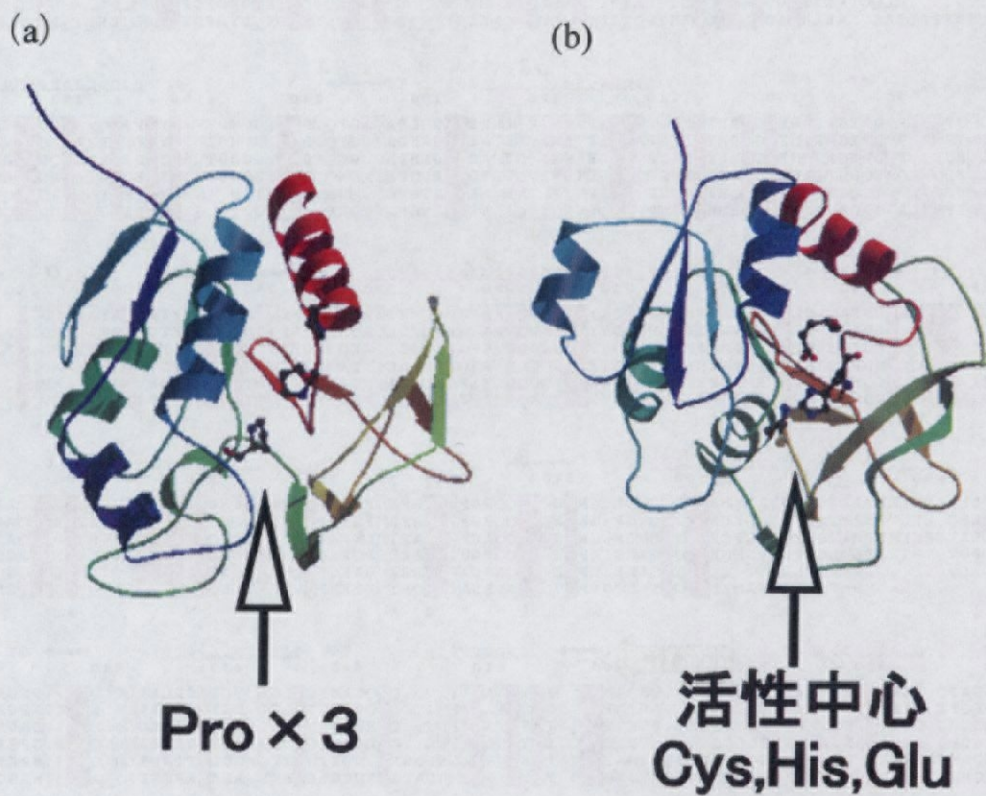


図 1-25 A4- $\beta$ -Gal のドメイン B と類似構造

(a) A4- $\beta$ -Gal ドメイン B

(b) *S. solfataricus* アントラニル酸合成酵素 TrpG サブユニット

TrpG はシステイン、ヒスチジン、グルタミン酸から成る活性中心を持つが、A4- $\beta$ -Gal では相当する残基は全てプロリン





- A4-bGal *Thermus thermophilus* A4
- TT2-bGal *Thermus sp.* T2
- Tne-bGal *Thermus neapolitana*
- Hal-bGal *Haloferax alicantei*
- Cpi-bGal *Carnobacterium piscicola* BA
- Ype-bGal *Yersina pestis*

- ▲ 活性中心残基
- 基質認識残基
- ★ サブユニット間水素結合形成残基
- 金属結合サイト形成システイン

図 1-26 GH-42のアラインメント



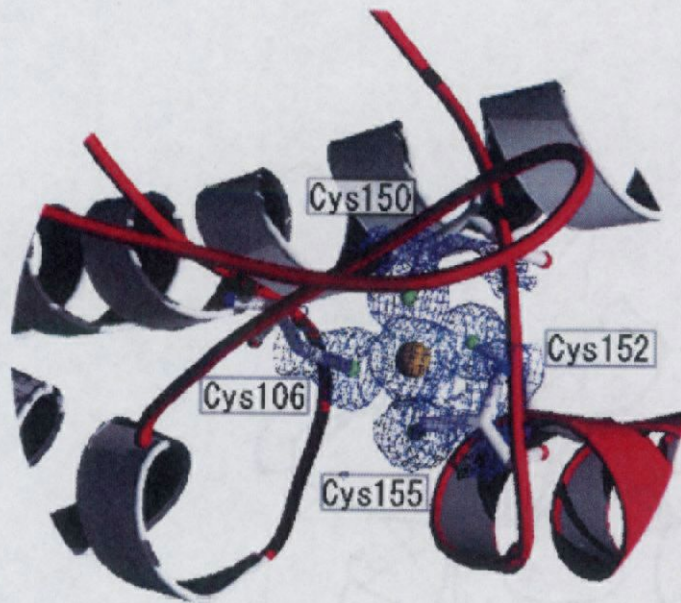


図 1-27a A4- $\beta$ -Galの金属結合部位の $2|F_{\text{obs}}| - |F_{\text{calc}}|$ 電子密度マップ( $1\sigma$ )。赤色で示したヘリックス、ループ上にある4つのシステインが金属結合クラスターを形成する。

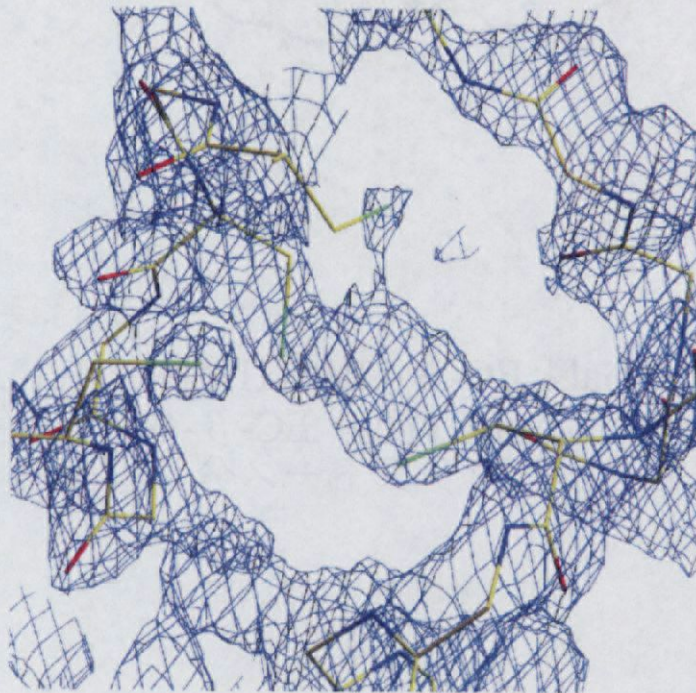


図 1-27b 結晶により、金属が外れた電子密度を呈するものがある ( $0.8\sigma$ )



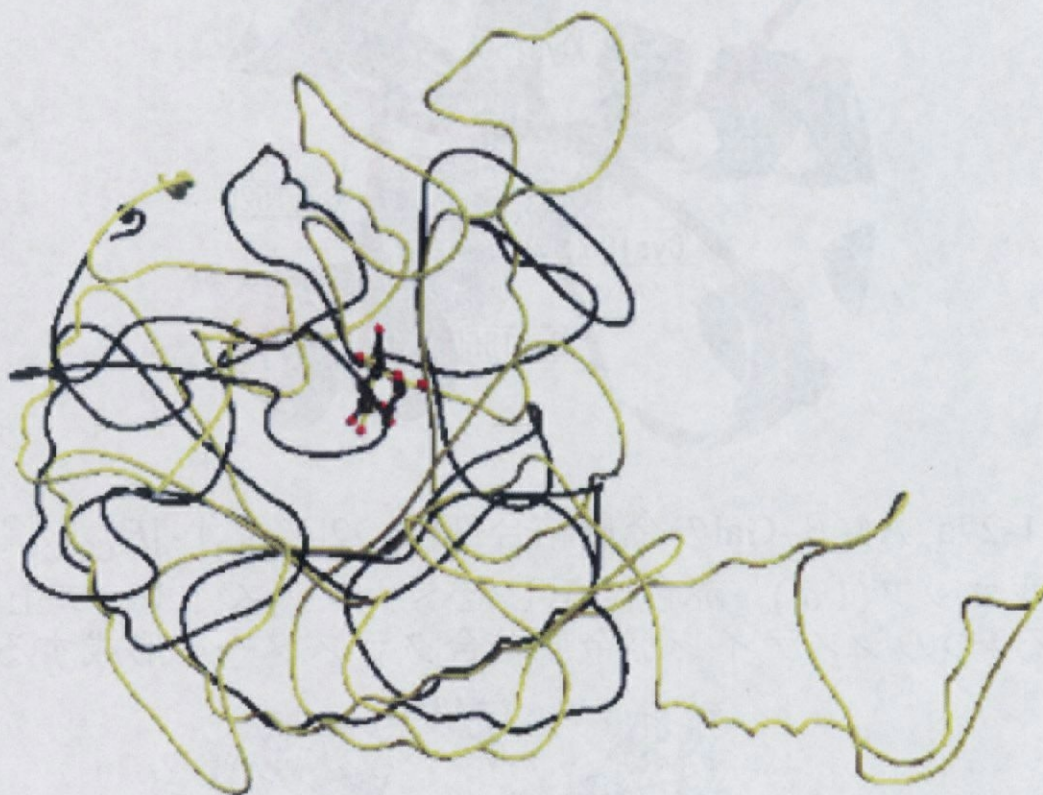


図 1-28 A4- $\beta$ -GalとEC- $\beta$ -GalのTIMバレルドメインの重ね合わせ。A4- $\beta$ -Galを黄色、EC- $\beta$ -Galを黒色で表した。それぞれに結合したガラクトース分子を表示した。



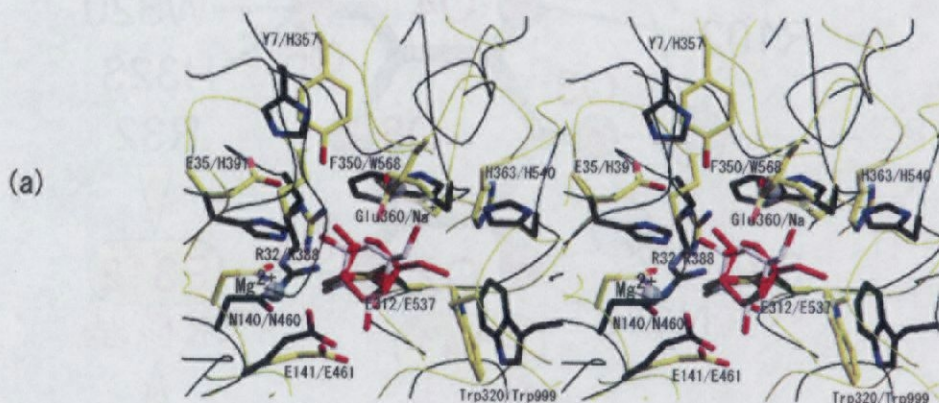


図 1-29a A4- $\beta$ -GalとEC- $\beta$ -Galの活性中心部位の重ね合わせのステレオ図。残基番号はA4- $\beta$ -Gal/EC- $\beta$ -Galの順番。触媒残基Glu141/Glu461、Glu312/537の距離が最も近くなるように重ね合わせた。

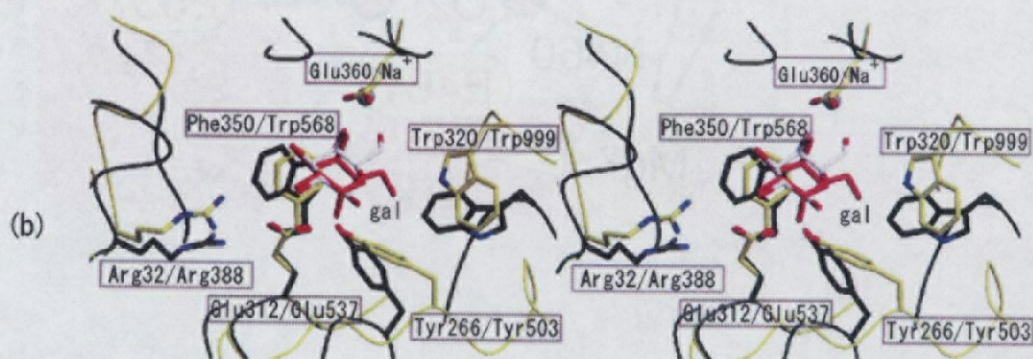


図 1-29b 求核基Glu312/537の周辺部位。求核基まわりのTyr-Glu-Argの構造が共通している。Phe350/Trp568は主鎖構造がシスペプチド結合を形成しており、ともにガラクトースのピラノース環と疎水的相互作用を形成。