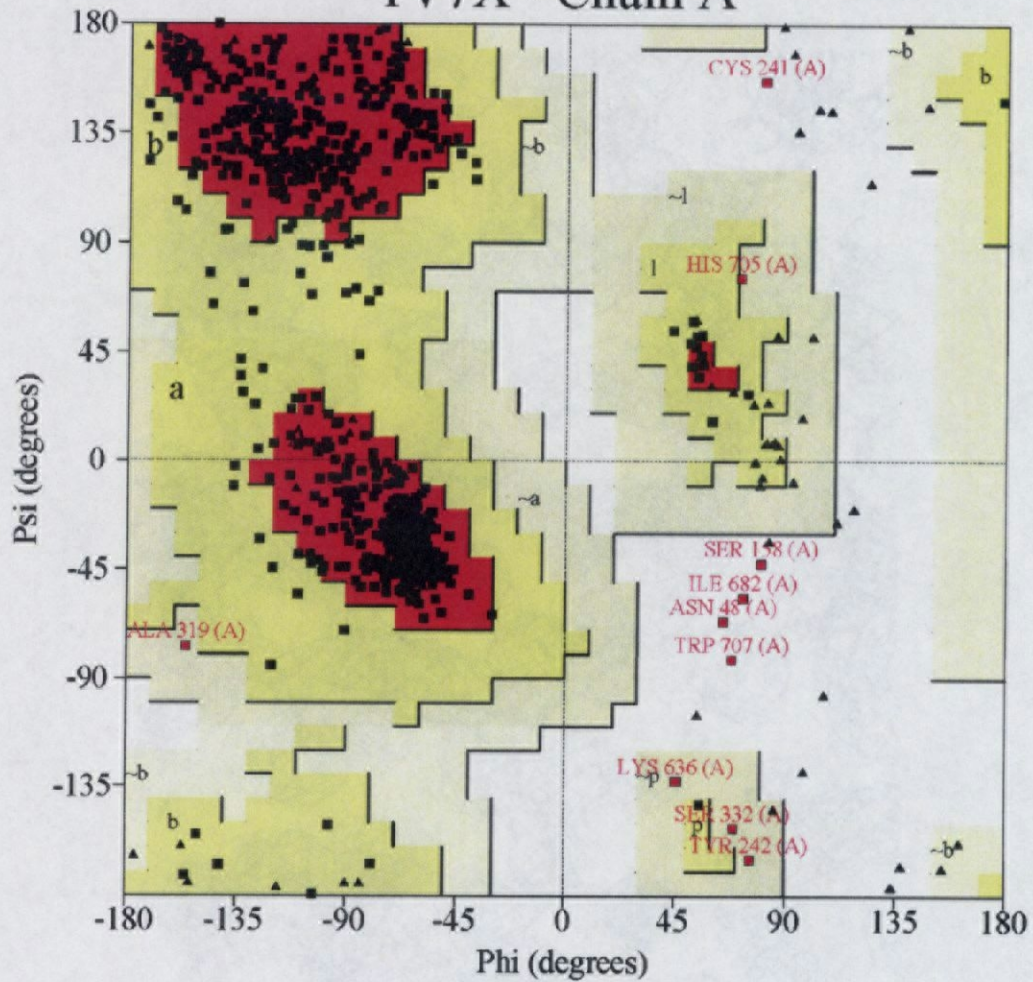


図 2-11 ChBPの $2|F_{\text{obs}}| - |F_{\text{calc}}|$ 電子密度マップ
(分解能1.6 Å、 1σ)

PROCHECK

Ramachandran Plot

1V7X - Chain A



Plot statistics

Residues in most favoured regions [A,B,L]	600	88.9%
Residues in additional allowed regions [a,b,l,p]	65	9.6%
Residues in generously allowed regions [-a,-b,-l,-p]	5	0.7%
Residues in disallowed regions	5	0.7%

Number of non-glycine and non-proline residues	675	100.0%
Number of end-residues (excl. Gly and Pro)	2	
Number of glycine residues (shown as triangles)	68	
Number of proline residues	34	

Total number of residues	779	

Based on an analysis of 118 structures of resolution of at least 2.0 Angstroms and R-factor no greater than 20%, a good quality model would be expected to have over 90% in the most favoured regions.

図 2-12 ChBP構造のラマチャンドランプロット

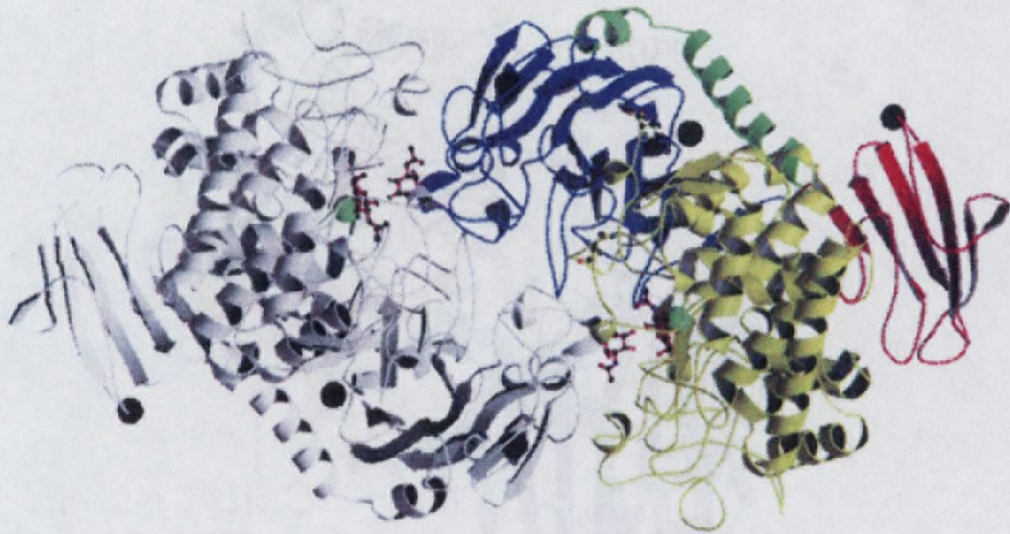


図 2-13 ChBPの二量体構造。片方のサブユニットのN末端ドメインを青色、リンカーヘリックスを緑色、 α -バレルドメインを赤色、C末端ドメインを赤色で表した。もう一方のサブユニットを白色で表した。結合したカルシウムを黒、GlcNAc分子を黄色で表示した。

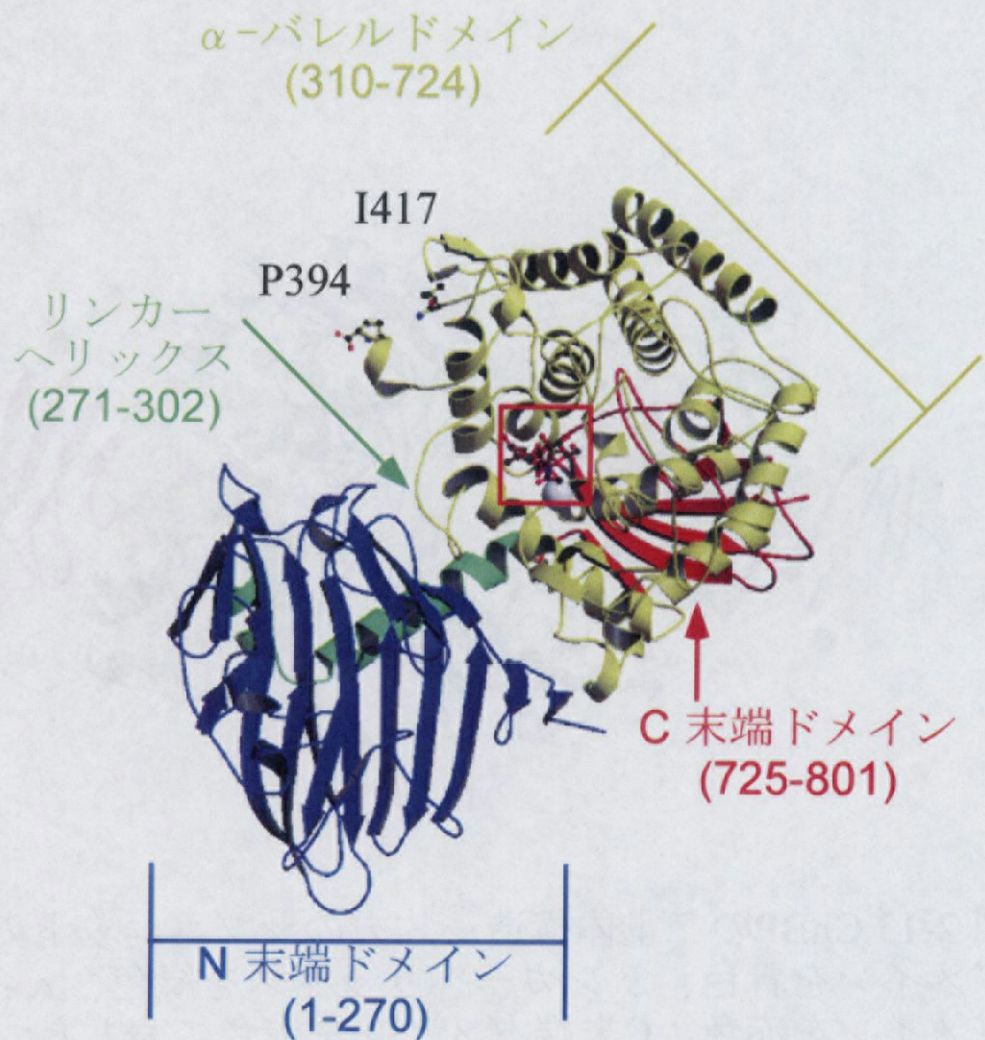


図 2-14 ChBPの単量体構造。N末端ドメインを青色、リンカーヘリックスを緑色、α-バレルドメインを赤色、C末端ドメインを赤色で表した。P394-I417間はDisorder構造を示していたため、構造を構築することができなかった。

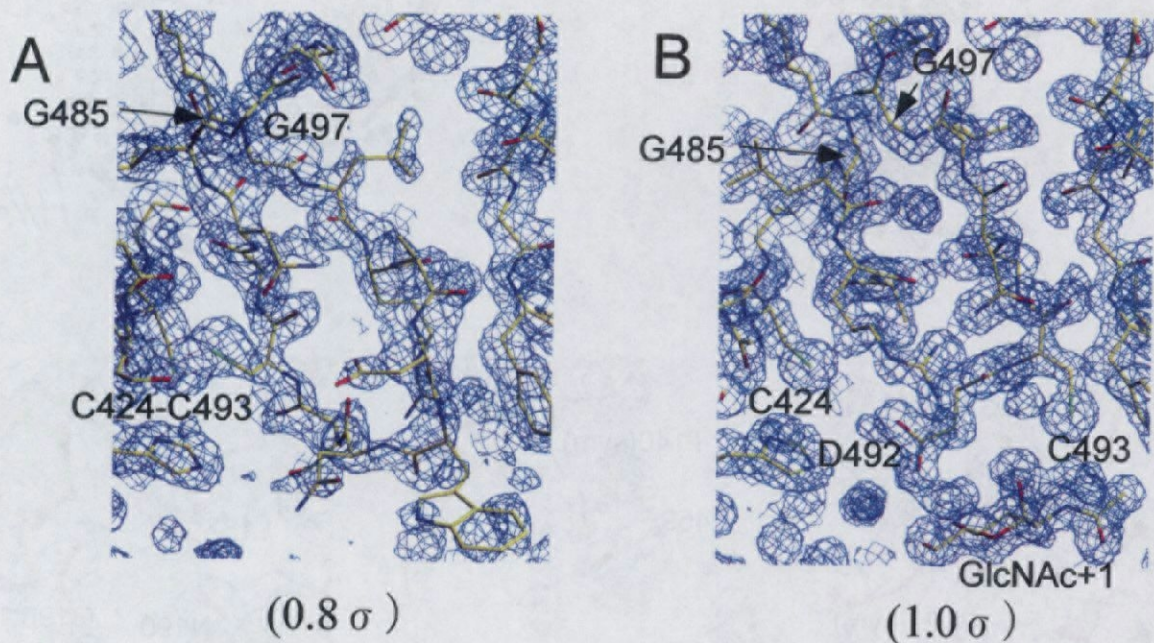


図 2-15 GlcNAcの結合による構造変化
 (A)GlcNAcが結合していない構造では、Cys424-Cys493がジスルフィド結合を形成し、Gly485-Gly497間のループがねじれ、乱れた電子密度を呈する。
 (B)GlcNAcが結合した構造では、Cys424-Cys493間のジスルフィド結合は切断され、ループのねじれは解けている。このループの反転はGly485、Gly497をHingeとして起こる。

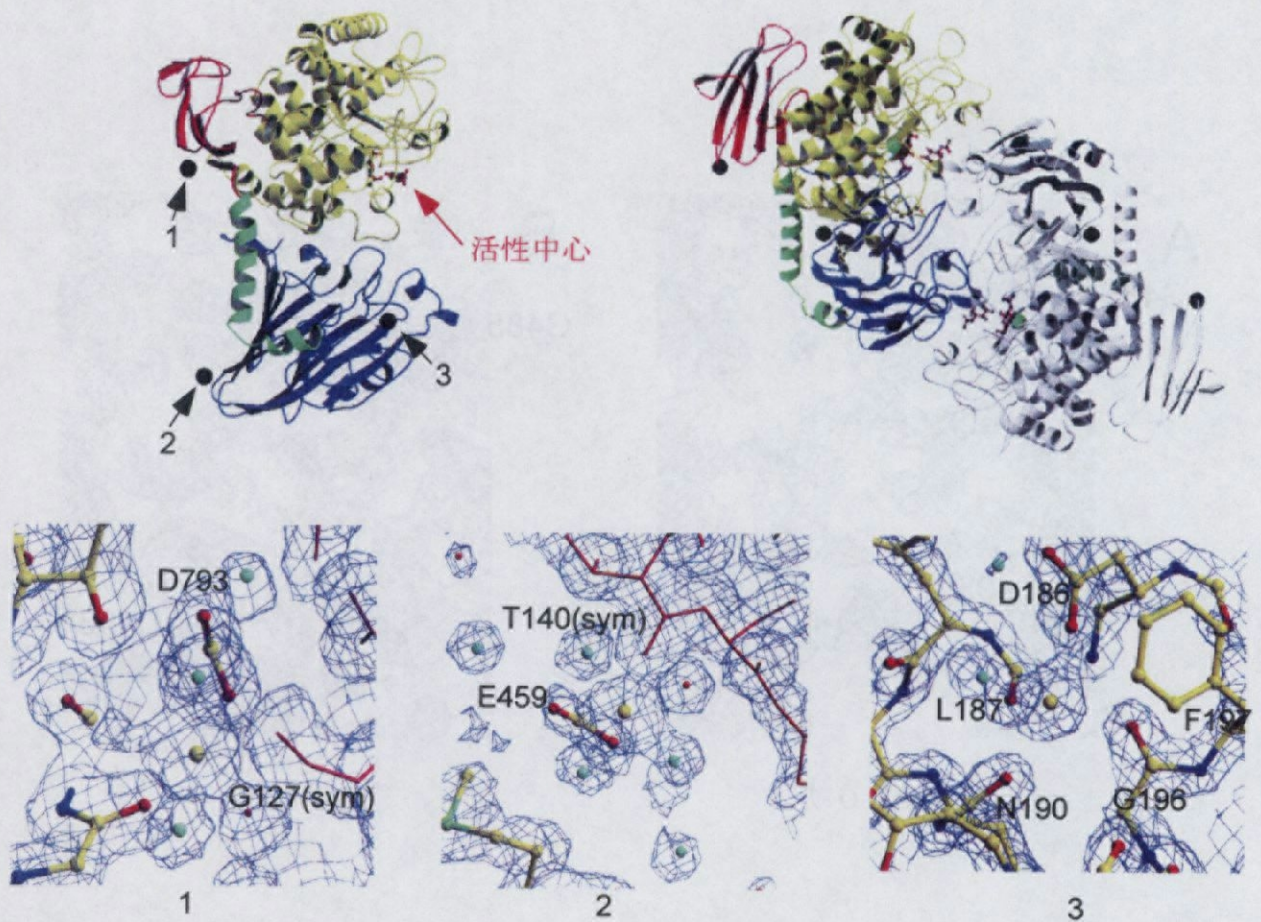


図 2-16 Ca^{2+} の結合位置と $2|F_{\text{obs}}| - |F_{\text{calc}}|$ 電子密度マップ (1σ)。
 Ca^{2+} の結合位置は、サブユニット界面にあり、活性中心部位から離れた位置である。触媒反応に関与しない。