

# 構造生物学

## 3. $\alpha$ ドメイン, $\alpha/\beta$ ドメイン

1

## モチーフの組み合わせからみた タンパク質構造の分類

$\alpha$ ドメイン構造

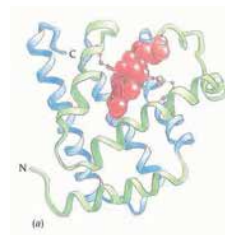


Fig 2-9  
(3章)

$\alpha/\beta$ ドメイン構造

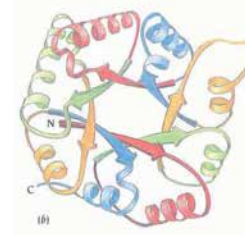


Fig 2-10b  
(4章)

$\beta$ ドメイン構造

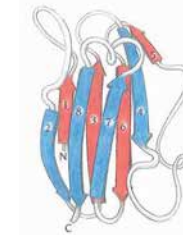


Fig 2-11c  
(5章)

2

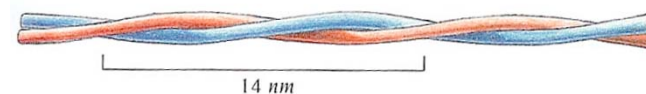
## $\alpha$ ドメイン構造

(注：ここでは可溶性タンパク質のみ)

3

## コイルドコイル構造

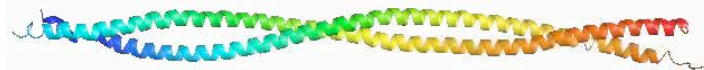
2本の $\alpha$ ヘリックスが巻きついたもの



左巻きの「超らせん」

4

## 例：トロポミオシンの構造



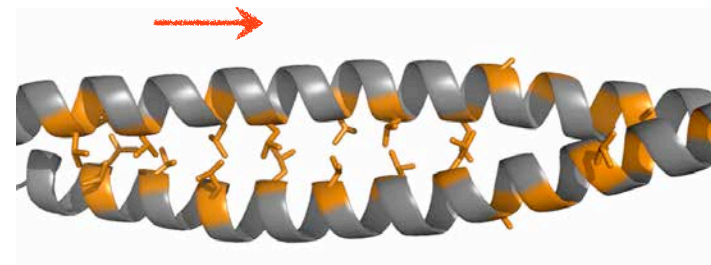
@2b9c-1.txt

PDBID: 2B9C

5

## ヘリックスバンドルの構造「原理」

@2b9c-2.txt



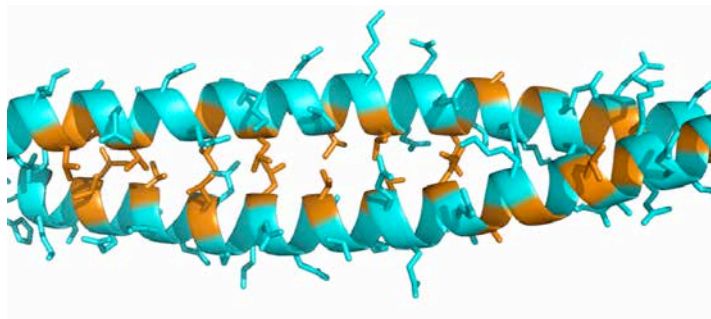
2本は逆平行

cf Fig. 3-3 ~ 3-4

6

## ヘリックスバンドルの構造「原理」

@2b9c-3.txt

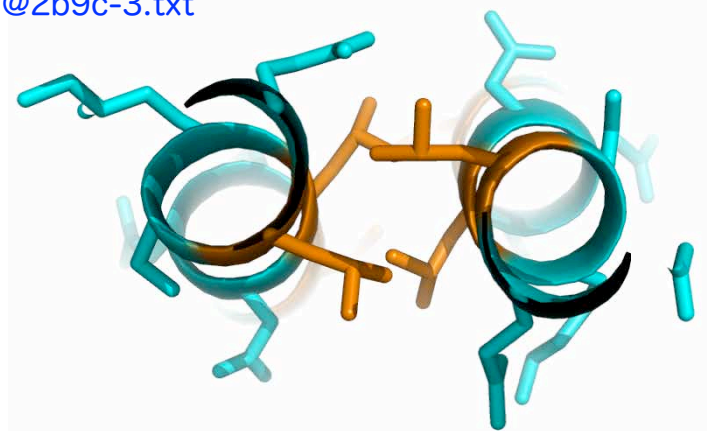


cf Fig. 3-3 ~ 3-4

7

## ヘリックスバンドルの構造「原理」

@2b9c-3.txt

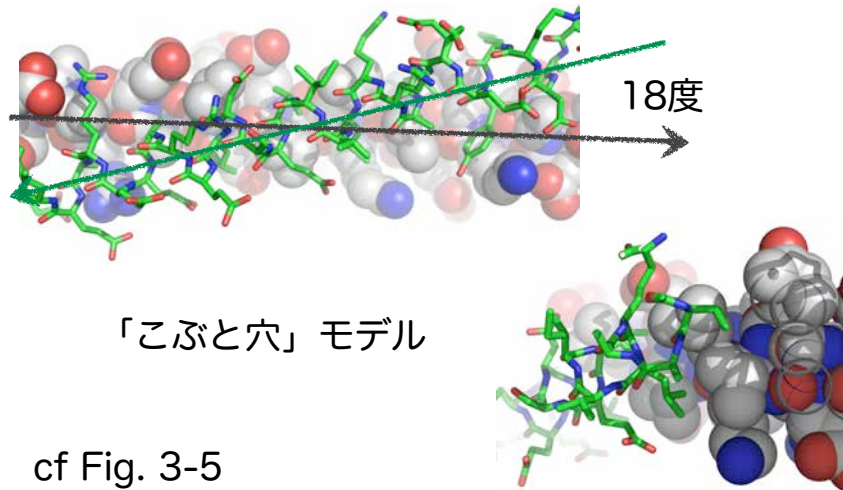


cf Fig. 3-4

8

# ヘリックスのパッキング

@2b9c-4.txt

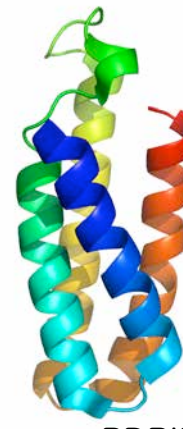


9

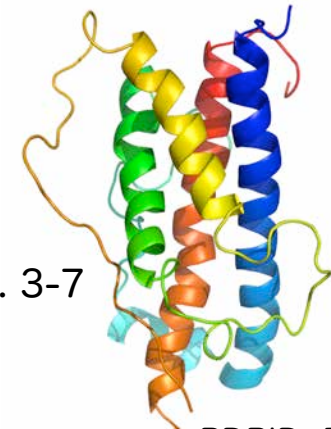
# 4本ヘリックスの場合

Cytochrome B562

Human Growth Hormone



PDBID: 4ER9



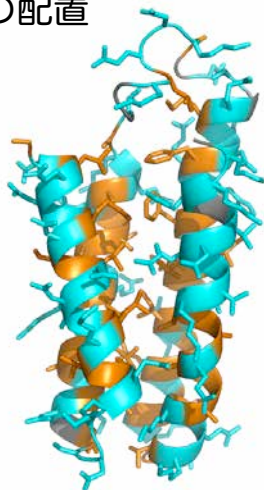
PDBID: 1HGU

cf Fig. 3-7

10

# 4本ヘリックスの場合

側鎖の配置



@hydrophobic.txt

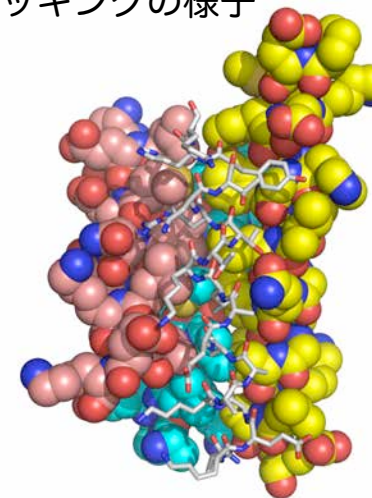
@hydrophilic.txt

cf Fig. 3-6

11

# 4本ヘリックスの場合

パッキングの様子



@4er9-1.txt

cf Fig. 3-5

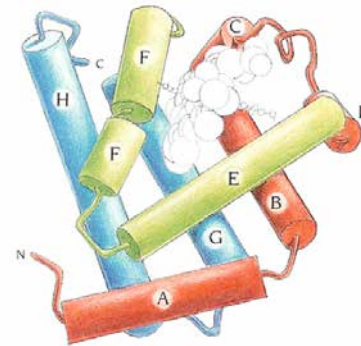
12

より複雑な $\alpha$ ドメイン構造

13

## グロビン・フォールド

globin fold : 8本の $\alpha$ ヘリックス



ミオグロビン, ヘモグロビン

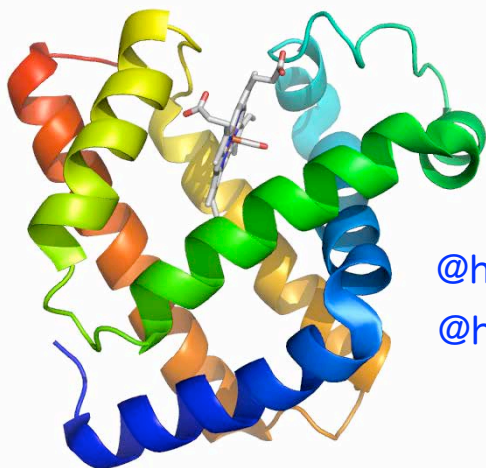
規則性はなく  
単純ではない

しかし, 16%の配列相同性でも同じ構造を示す

Fig. 3-10

14

## ミオグロビン



@hydrophobic.txt

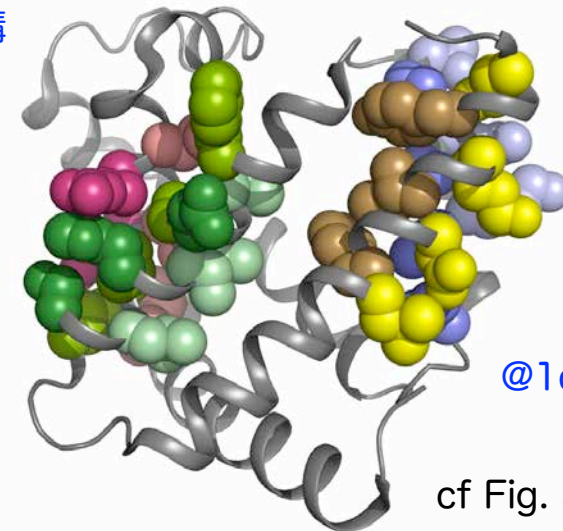
@hydrophilic.txt

PDBID: 1DWR

15

## ヘリックスのパッキングルール

縁と溝



@1dwr-1.txt

cf Fig. 3-11, 12

16

# $\alpha/\beta$ 構造

最も一般的な構造

17

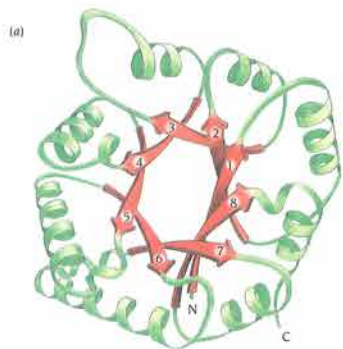
## $\alpha/\beta$ 構造の分類

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

18

## 1. $\alpha/\beta$ バレル

(TIM バレル)



8本の平行 $\beta$ ストランドからなる閉じたバレルと外側の $\alpha$ ヘリックス

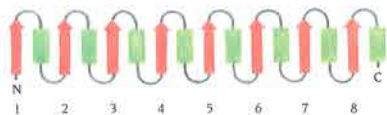
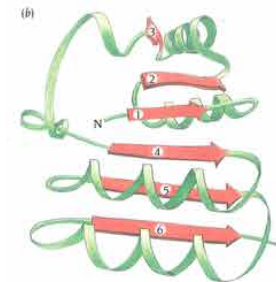


Fig. 4-1

19

## 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 $\beta$ シートとシート両面の $\alpha$ ヘリックス

構造の多様性大

$\beta$ ストランド数 4~10本

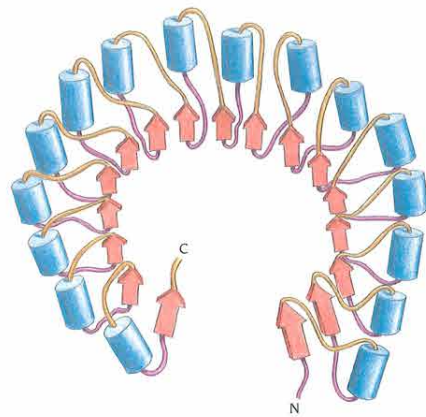


Fig. 4-1

20

### 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

21

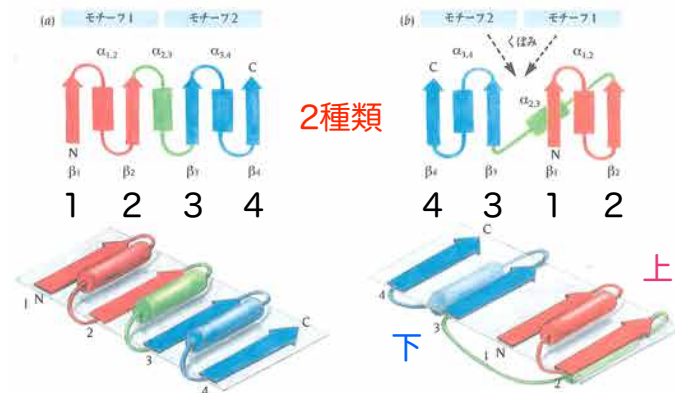
### $\alpha/\beta$ 構造に共通する特質

- (1)  $\beta$ - $\alpha$ - $\beta$ 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

22

### $\beta$ - $\alpha$ - $\beta$ モチーフの繋がり方

4本ストランドの平行 $\beta$ シートの場合



$\beta$ - $\alpha$ - $\beta$ モチーフは「右巻き」

Fig. 4-2

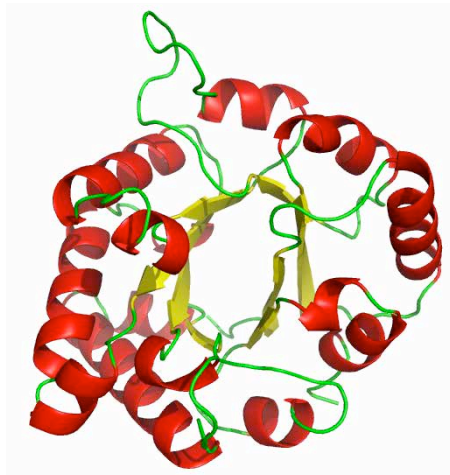
23

### 1. $\alpha/\beta$ バレル (TIMバレル)

24

# $\alpha/\beta$ バレル

(TIMバレル)



@8tim-1.txt

ニワトリ  
トリオースリン酸異性化酵素

PDB ID: 8TIM

25

# $\alpha/\beta$ バレルの成り立ち

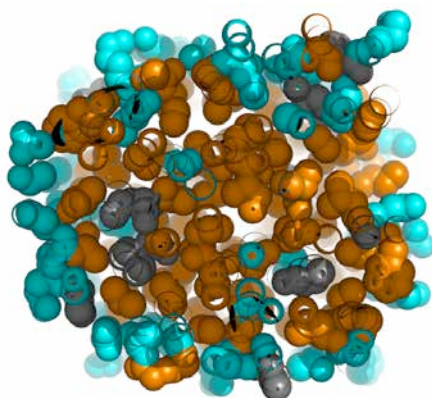


@8tim-2.txt

cf. Fig. 4-3

26

# $\alpha/\beta$ バレルの成り立ち



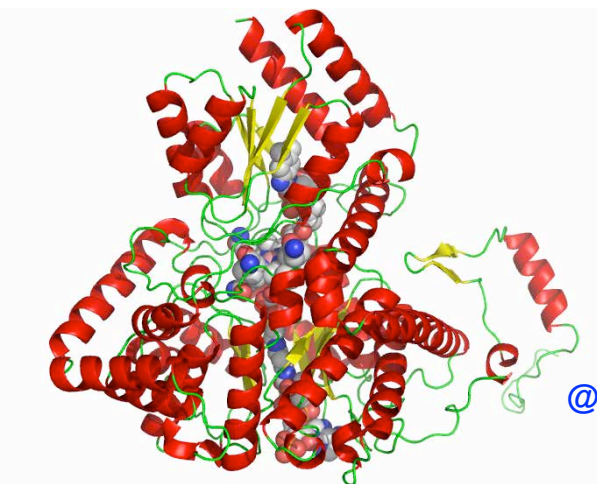
@8tim-3.txt

cf. Fig. 4-3

27

例外

# メチルマロニル補酵素Aムターゼ



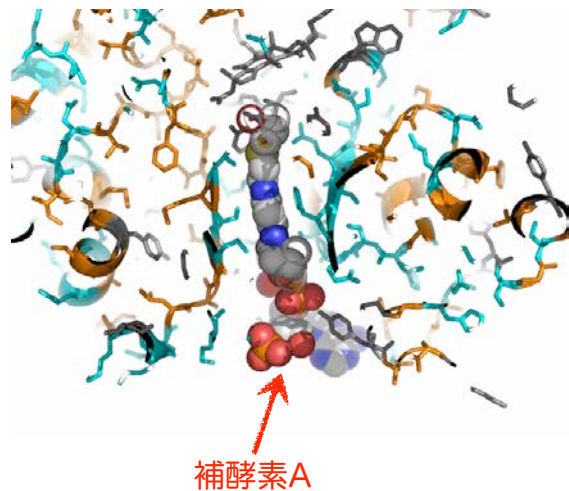
@4req-1.txt

PDB ID: 4REQ

28

例外

## メチルマロニル補酵素Aムターゼ



@4req-2.txt

cf. Fig. 4-4

29

## $\alpha/\beta$ バレル・ドメイン

・複数のドメインからなるタンパク質の  
1つのドメイン

p51

・バレルが2つ繋がった酵素

p52

30

## $\alpha/\beta$ バレル酵素の活性部位



Fig. 4-8

31

## RuBisCoの実際



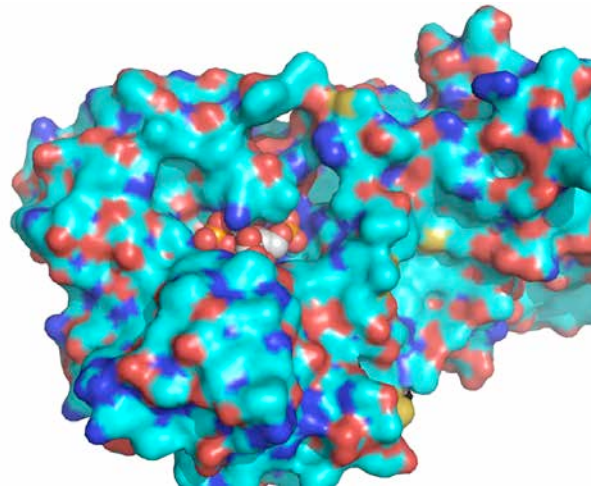
@8ruc-1.txt

PDB ID: 8RUC

32



## RuBisCoの実際

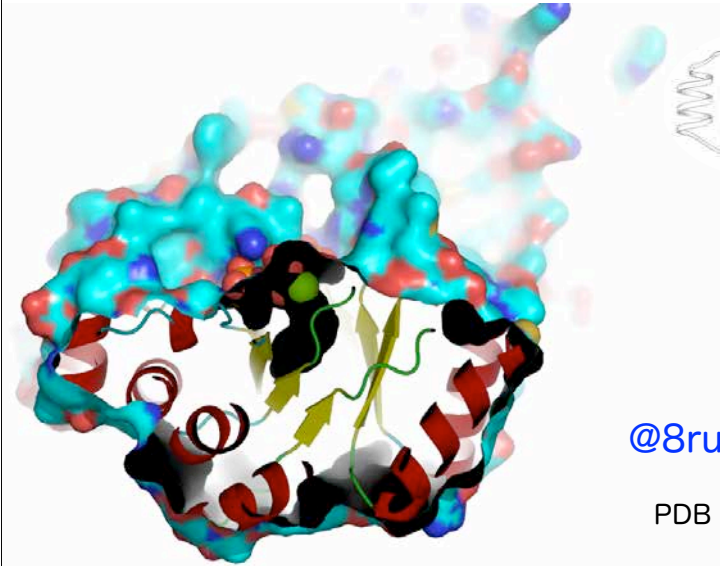


@8ruc-2.txt

PDB ID: 8RUC

33

## RuBisCoの実際



@8ruc-3.txt

PDB ID: 8RUC

34

## 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

35

## ねじれたオープン・シートの構造と活性部位

$\beta$ ストランドのC端側

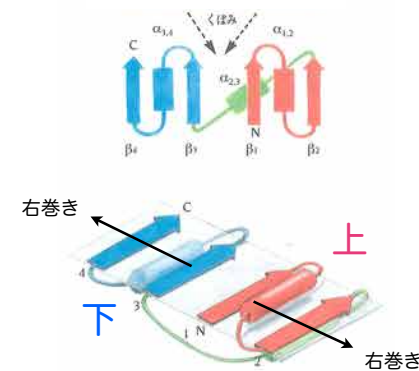


Fig. 4-2

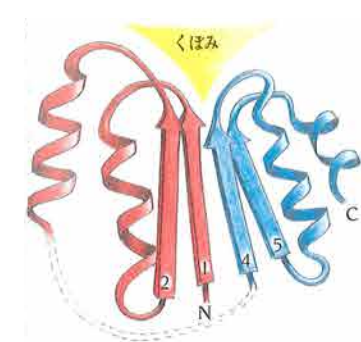
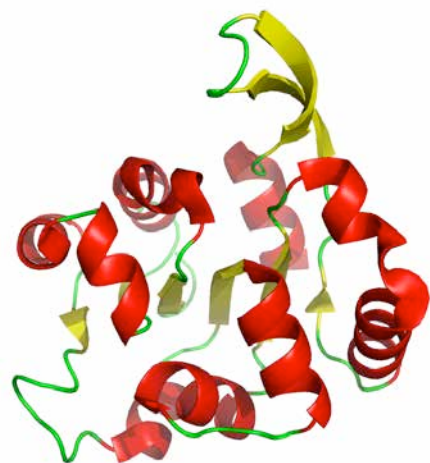


Fig. 4-13

36

## ねじれたオープン・シートの例



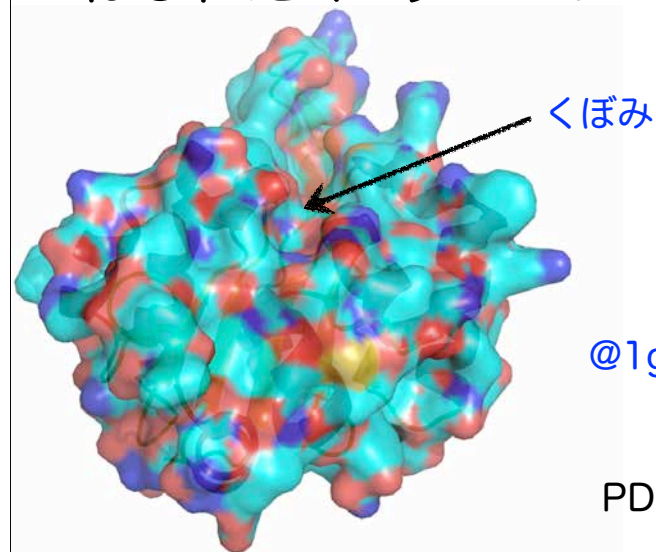
*Staphylococcus epidermidis*  
脱炭酸酵素

@1g5q-1.txt

PDB ID: 1G5Q

37

## ねじれたオープン・シートの例



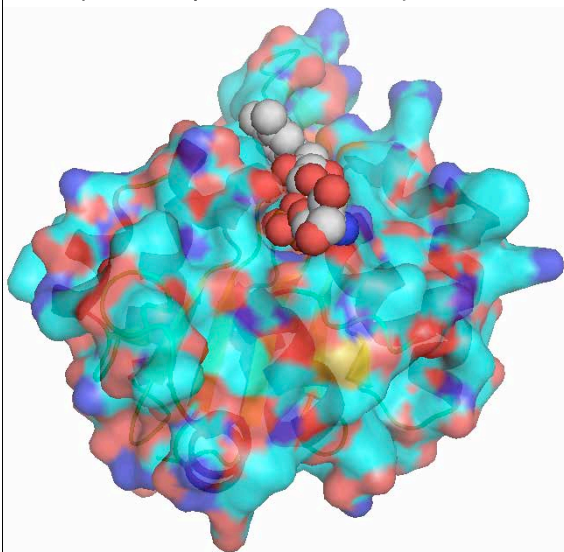
くぼみ

@1g5q-2.txt

PDB ID: 1G5Q

38

## ねじれたオープン・シートの例



@1g5q-3.txt

PDB ID: 1G5Q

39

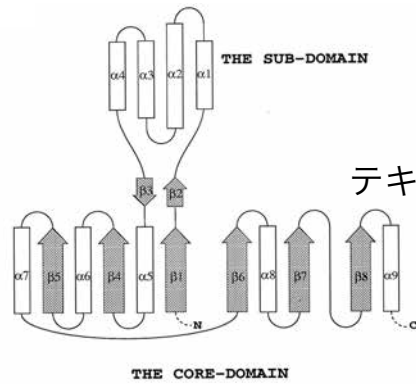
p59~64

## いろいろな $\alpha/\beta$ 構造と 活性部位の具体例

チロシル-tRNA合成酵素  
カルボキシペプチダーゼ  
アラビノース結合タンパク質

40

### 課題 3



左の図は、L-2-ハロ酸デハロゲナーゼという酵素のトポロジー図である。

テキスト

このタンパク質の活性部位はどこにあると考えられるか。

理由も書け。

参考：PDB 1qh9