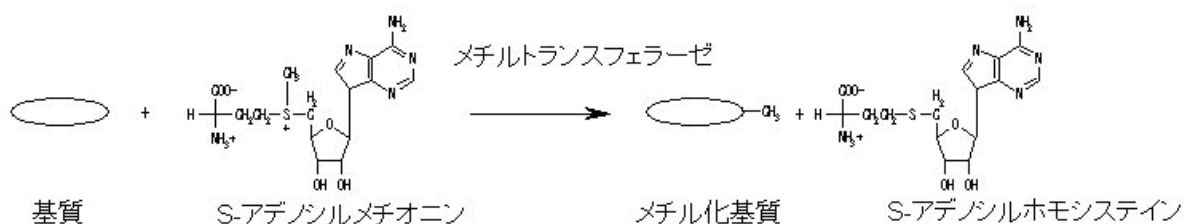


高度好熱菌 *Thermus thermophilus* HB8 由来 TT1324 の X 線結晶解析X-ray structure of TT1324 from *Thermus thermophilus* HB8安部暁美¹, 吉田裕美¹, 神鳥成弘^{1,2}, 上利佳弘², 金川真由美², 倉光成紀^{2,3}Akemi Abe¹, Hiromi Yoshida¹, Shigehiro Kamitori^{1,2}Yoshihiro Agari², Mayumi Kanagawa², Seiki Kuramitsu^{2,3}(¹香川大学, ²理研播磨研, ³大阪大院理)(¹Kagawa Univ., ²RIKEN, Harima Inst., ³Grad. School of Sci., Osaka Univ.)

e-mail: kamitori@med.kagawa-u.ac.jp

生体内のメチル基転移反応はメチルトランスフェラーゼが触媒する。その大部分は、S-アデノシルメチオニンをメチル基の供与体とし、基質のアミノ基、ヒドロキシル基、チオール基をメチル化する。*Thermus thermophilus*においても、これまでに8種類のメチルトランスフェラーゼのX線結晶解析が報告されている(PDB code, 1UFK, 1UIR, 1V2X, 1V6Z, 1V9A, 1WG8, 1WS6, 1WXX)。TT1324も、構造中にS-アデノシルホモシステイン(S-アデノシルメチオニンがメチル基を失ったもの)を持っていたことから、メチルトランスフェラーゼであると考えられる。



Crystal Data : Space group $F6_522$, $a = 161.7$, $b = 161.7$, $c = 139.9$ Å, Resolution range 50 - 2.6 Å, No. reflections = 31,677, Completeness = 93.9%, R (R-free) = 0.215 (0.239)

TT1324は、図1に示すように大小2つのドメインから構成されている。大きなドメインは、7本のβ-ストランドからなる大きな1枚のβ-シートを中央にし、その両側をα-ヘリックスが取り囲む、Rossmann foldと呼ばれるもので、S-アデノシルホモシステインが結合している。小さなドメインは、α-ヘリックスとループからなり、大きなドメインとの界面で基質結合部位と考えられるポケットを形成しており、一部分にギ酸が結合している。現在、TT1324の基質候補として、このポケットに適合する化合物を探索中である。また、TT1324は、結晶中非対称単位に2分子存在し、近似的2回軸対称を持つ2量体構造をとっている(図2)。通常、小さな基質に対応するS-アデノシルメチオニン依存性メチルトランスフェラーゼはモノマー構造をとることが多く、この2量体構造が水溶液中でも存在するか否についても実験をすすめている。

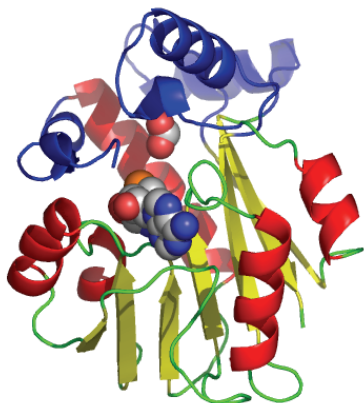


図1(左). TT1324の全体構造。小さなドメインを青色で示す。大きなドメインにはS-アデノシルホモシステインが、基質ポケットにはギ酸が結合している。

図2(右). TT1324の2量体構造。それぞれのサブユニットを緑と赤紫で示す。

