

Geobacillus kaustophilus 由来 PurD タンパク質の結晶構造解析Crystal structure of GAR synthetase from *Geobacillus kaustophilus*○馬場清喜^{1,2}, 金川真由美¹, 中川紀子^{1,2}, 海老原章郎¹, 河合剛太^{1,3}, 三瓶巖一^{1,4}Seiki Baba^{1,2}, Mayumi Kanagawa¹, Noriko Nakagawa^{1,2},Akio Ebihara¹, Gota Kawai^{1,3}, Gen-ichi Sampei^{1,4}(¹理研・播磨研, ²阪大・院理, ³千葉工大・工, ⁴電通大・量子物質工)(¹RIKEN Harima Institute, ²Osaka University, ³Chiba Institute of Technology,⁴University of Electro-Communications)

e-mail: gkawai@sea.it-chiba.ac.jp, sampei@pc.uec.ac.jp

今回私達は, *Geobacillus kaustophilus* (*G. kaustophilus*)の GAR synthetase (PurD) の構造について報告する. PurD は, この経路の二番目の反応, すなわち PRA を GAR に転換する反応を触媒する.

Native の PurD について, 0.7 x 0.2 x 0.1 mm³ の大きさの単結晶を得ることができた. 得られた結晶を用い, BL26B1(SPring-8)において, データを測定した(表1). 解析の結果, 非対称単位中に1つのタンパク質分子を含んでいることがわかった. *Escherichia coli* (*E. coli*) PurD を元に Modeller でモデル構造を構築し, そのモデル構造から molrep を用いて分子置換法を行った. さらに, reffmac, CNS により精密化を行ったところ, 最大分解能 2.2 Å において, R = 21.9%, free R = 25.2%となり, 十分な分解能の結晶構造を求めることができた.

今回の発表では分子置換のモデルとした *E. coli* PurD と, すでに我々が構造を決定している *Thermus thermophilus* (*T. thermophilus*) PurD の構造と比較を行った(図1). PurD は, A, B, C および N の4つのドメインからなっている. 今回決定した *G. kaustophilus* PurD と *E. coli* PurD の構造を比較すると(Fig. 1.), A, C, N ドメインについては, 互いに類似した構造であった. しかし, B ドメインのみを比較すると構造は似ていたが, 構造全体を重ね合わせると B ドメインの配置が異なっていた. *T. thermophilus* PurD と比較すると, B ドメインの配置も良く似ており, 4つのドメイン全体について, 非常に良く似ていることが分かった.

現在, 反応様式の比較を行うため基質を加えた結晶の作成, 解析を行っている.

表1. *G. kaustophilus* PurD の
結晶学的データ

Data collection	
Space group	<i>P</i> 2 ₁ 2 ₁ 2 ₁
a, b, c (Å)	51.2, 83.6, 94.7
A, B, γ (°)	90.0, 90.0, 90.0
Wave length (Å)	1.0000
Dmini (Å)	1.88
Completeness (%)	99.7
Rsym (%)	8.9

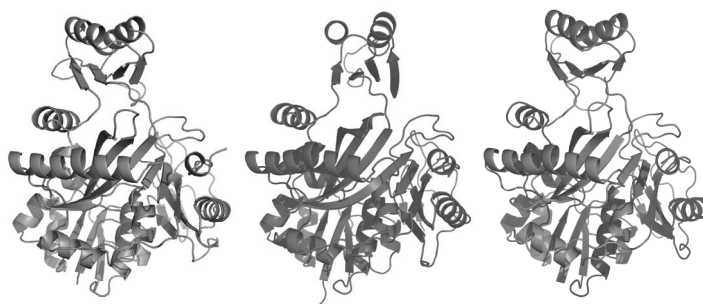


図1. *G. kaustophilus* PurD, *E. coli* と *T. thermophilus* PurD の結晶構造